위대한 김일성동지와 김정일동지는
영원히 우리와 함께 계신다

김일성종합대학학보

물리학

제 65권

JOURNAL OF KIM IL SUNG UNIVERSITY
Physics Vol. 65 No. 4



김일성종합대학출판사

4

주체 108(2019)

김일성종합대학학보 주체108(2019)년 제65권 제4호
물 리 학 (루계 제577호)

차 례

5-산소배위구조를 가진 TiO_2의 나트리움이온축전지 음극재료응용에 대한 제 1 원리적연구

최성혁, 리금철, 유철준

경애하는 최고령도자 **김정은**동지께서는 다음과 같이 말씀하시였다.

《과학기술부문에서는 새로운 원리에 기초한 에네르기전환기술과 에네르기저장기술에 대한 연구사업을 강화하여 나라의 전력공업을 첨단수준에 올려세우는데 적극 이바지하여야 합니다.》

날을 따라 늘어나고있는 에네르기에 대한 수요와 화석연료의 고갈, 심각한 환경오염으로 하여 오늘날 지속가능하며 친환경적인 자연에네르기를 개발리용하기 위한 연구가 더욱더 심화되고있다. 태양에네르기나 풍력에네르기와 같이 공급이 지속적이지 못한 자연에네르기를 리용하기 위해서는 에네르기의 생산과 소비사이의 균형을 보장하기 위한 에네르기저장체계가 결합되여야 하며 그것은 반드시 매장량이 풍부하고 친환경적이며 가장 중요하게는 원가가 낮은 자원에 기초하여야 한다.

오늘날 휴대용전자장치들에서 가장 널리 리용되고있는 리티움이온축전지는 원가가 높고 일련의 부족점을 가지고있다. 따라서 리티움에 의존하지 않는 원가가 낮으면서도 그 성능이 리티움이온축전지와 류사하거나 지어 우월한 새로운 비리티움축전지기술의 개발에 관심이 돌려지고있다. 이러한 속에 자원이 무진장하며 리티움과 가장 류사한 나트리움을 리용한 나트리움이온축전지기술이 커다란 관심을 모으고있다.[1] 나트리움이온축전지를 상업화하는데서 나서는 가장 중요한 문제는 에네르기저장밀도가 높고 이온전도성이 좋은 음극 및 양극재료를 개발하는것이다.

론문에서는 고성능나트리움음극재료로 리용될수 있는 5-산소배위구조를 가진 TiO_2에 대한 제1원리적연구를 진행하였다.

이온축전지의 음극재료들은 금속나트리움표준전극에 대하여 비교적 낮은 전극전압과 높은 에네르기밀도를 가져야 하며 이온전도성이 좋을뿐아니라 충방전과정에 비가역적인 변화 즉 화학적 및 구조적변화를 일으키지 말아야 한다.

TiO_2의 5-산소배위결정구조는 실험적으로 발견되지는 않았지만 최근 어느 한 연구집단이 리론적인 계산을 통하여 TiO_2이 가질수 있는 결정형이라고 밝힌 새로운 결정구조로서 그림 1에서 보는바와 같이 쌍3각프리즘형(Trigonal Biprismic, TB)다면체들로 이루어진 6각형고리가 *b*축을 따라 겹쌓여져 1차원통로형구조를 이룬다. 또한 통로의 직경이 5.6～6.7Å으로서 통로공간이 매우 넓다.[2] 이러한 결정구조는 많은 나트리움이온을 저장할수 있는것과 동시에 나트리움이온의 높은 이동성을 보장할수 있다.

계산은 Quantum ESPRESSO 6.2에 있는 의포텐샬평면파방법을 리용하여 진행하였다. 초유연의포텐샬을 리용하여 이온전자호상작용을 고려하고 값전자들의 교환호상작용은 PBE범함수를 리용하여 고려하였다.

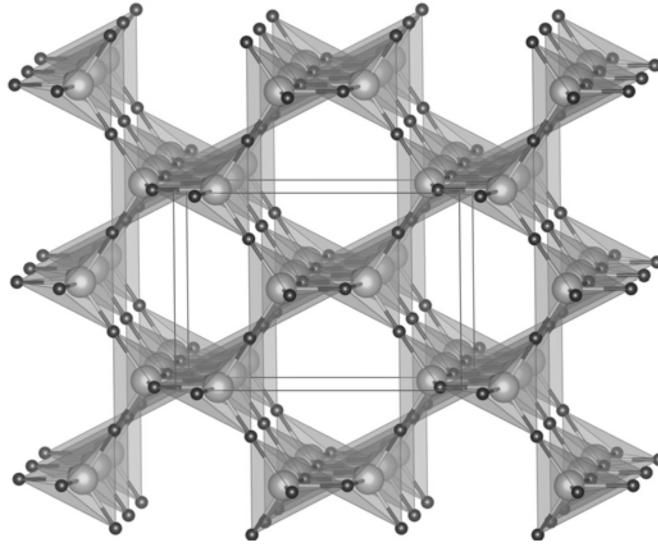


그림 1. 5-산소배위구조를 가진 TiO_2의 다면체적구조

우선 Na_xTiO_2(x=0～1)에 대한 구조모형들을 작성하고 완전구조최적화를 진행하여 나트리움양이온이 삽입된 경우의 구조적안정성을 평가하였다. 표에 완전구조최적화결과 얻어진 살창상수, 상대체적변화률, 결합에네르기와 형성에네르기를 보여주었다. 결합에네르기는 나트리움의 함량에 관계없이 모두 부의 값을 가지며 이것은 나트리움양이온이 결정구조속에 자발적으로 삽입된다는것을 보여준다. 또한 만충전상(x=0)과 만방전상(x=1)에 대하여 구한 형성에네르기의 값은 크기가 0.1eV미만으로서 충방전과정에 구조적변화가 그리 심하지 않으며 따라서 비가역적인 구조의 상변환에 의한 용량감소는 없다는것을 알수 있다. 그리고 상대체적변화률은 3.5%미만으로서 나트리움이온의 삽입에 대하여 새로운 결정구조가 매우 안정하다는것을 보여준다. 즉 이 재료는 TiO_2 1개의 구조단위당 1개의 나트리움이온을 삽입할수 있으며 따라서 ～335mA·h/g의 높은 비전하용량을 가지게 된다.

표. 완전구조최적화결과 얻어진 살창상수, 상대체적변화률, 결합에네르기, 형성에네르기

x	a/Å	b/Å	c/Å	$r_{체적}$/%	E_b /eV	E_f /eV
0	11.963	3.771	8.860	—	—	—
0.125	11.978	3.812	8.831	0.58	–2.20	–0.06
0.250	11.820	3.821	9.005	1.46	–2.13	–0.10
0.375	11.852	3.907	8.853	2.26	–1.94	–0.08
0.500	11.506	3.920	9.161	3.08	–1.84	–0.06
0.675	11.219	3.923	9.377	2.96	–1.79	–0.04
0.750	11.021	3.936	9.539	3.23	–1.77	–0.03
0.875	10.879	3.945	9.648	3.28	–1.74	–0.01
1.000	10.763	3.956	9.742	3.48	–1.73	—

다음으로 여러가지 나트리움함량에 따른 전에네르기계산값들을 리용하여 금속나트리움

기준전극에 대한 전극전압을 다음의 식에 의하여 평가하였다.[3]

$$V = -\frac{E_{x_j} - E_{x_i} - (x_j - x_i)E_{\mathrm{Na}}}{e(x_j - x_i)}$$

여기서 E_x, E_{Na}는 각각 Na_xTiO_2, 금속나트리움의 전에네르기값이며 e는 전기소량이다.

계산된 전극전압값을 그림 2에 보여주었다. 그림 2에서는 비교를 위하여 이 재료를 나트리움이온축전지음극재료로 리용하였을 때의 계산값(실선)과 리티움이온축전지음극재료로 리용하였을 때의 전극전압값(점선[2])을 함께 보여주었다. 그림 2에서 보는 바와 같이 많은 전극재료들에서와 마찬가지로 나트리움이온축전지에서의 전극전압값은 리티움이온축전지의 전극전압값에 비해 낮다.[4] 그것은 나트리움의 산화환원포텐샬이 리티움에 비하여 낮은것과 관련되며 또한 이 재료에서 나트리움이온과 리티움이온의 삽입위치가 차이나는 것과도 관련된다. 즉 나트리움이온은 6각형고리로 이루어진 통로공간속에 놓이며 리티움이온은 통로벽사이공간에 놓임으로써 산소음이온과 더 강하게 결합되여 높은 전극전압을 나타내게 된다.

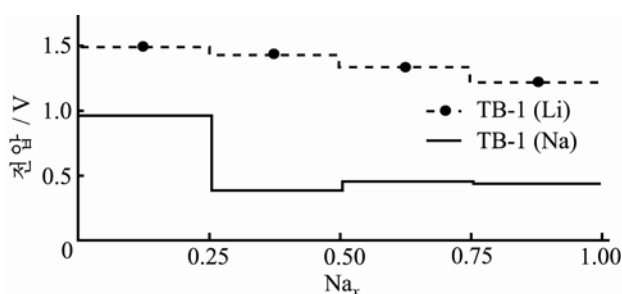


그림 2. Na_xTiO_2의 전극전압

일반적으로 금속나트리움표준전극에 대한 전극전압이 낮으면 그것을 음극재료로 리용하였을 때 전지의 동작전압이 높아져 에네르기밀도를 높일수 있다. 따라서 이 재료를 고성능나트리움이온축전지음극재료로 리용할수 있다.

마지막으로 론문에서는 이 재료에서 나트리움이온의 이온이동성을 평가하기 위하여 이동경로탐색방법인 NEB(Nudged Elastic Band)방법을 리용하여 이온이동에네르기를 계산하였다. 계산결과 $x<0.5$일 때에는 이온이동에네르기가 0.3eV미만으로서 리티움이온축전지음극재료들에서의 이동에네르기값보다 작은 값을 가지며 $x>0.5$일 때에는 0.6eV미만으로서 여전히 좋은 이온이동성을 보여준다.[5] 따라서 이 재료는 높은 충방전속도를 가지게 된다.

맺 는 말

5-산소배위구조를 가진 TiO_2재료의 나트리움이온축전지음극재료응용에 대한 제1원리적연구를 진행하였다. 결과 이 재료가 상대체적변화률이 4%미만으로서 구조적안정성이 매우 높으며 ～335mA·h/g의 높은 비전하밀도와 함께 ～0.56V의 낮은 전극전압을 가진다는것을 밝혔다. 또한 이온이동에네르기계산을 통하여 이 재료가 높은 에네르기밀도와 함께 빠른 이온이동성을 가진 고성능나트리움이온축전지음극재료로 리용될수 있다는것을 밝혔다.

참 고 문 헌

[1] M. Sawicki et al.; RSC Adv., 5, 53129, 2015.
[2] S. Ma et al.; Appl. Energy Mater., 1, 22, 2018.
[3] G. C. Ri et al.; J. Power Sources, 378, 375, 2018.
[4] S. Ong et al.; Energy Environ. Sci., 4, 3680, 2011.
[5] K. Nobuhara et al.; J. Power Sources, 243, 585, 2013.

주체108(2019)년 6월 5일 원고접수

First Principles Study on TiO_2 with Penta-Oxygen-Coordinated Crystal Structure as Sodium Ion Battery Anode Material

Choe Song Hyok, *Ri Kum Chol* and *Yu Chol Jun*

We investigated the suitability of TiO_2 with unprecedented penta-oxygen-coordinated crystal structure as sodium ion battery anode material by means of first principles calculation. The stability of this material upon Na^+ intercalation was verified by calculating the binding energies, formation energies and relative volume change rate, which was under 4%. The calculation results on electrochemical performances of this material also reveal the suitability as SIB anode, which shows a high specific capacity of ~335mAh/g, low electrode voltage of ~0.56V and fast ionic mobility. In conclusion, it is confirmed that TiO_2 with penta-oxygen-coordinated crystal structure is very promising for high performance SIB anode material.

Key words: sodium ion battery, first principles, anode

김일성종합대학학보 주체108(2019)년
물리학 제65권 제4호

시간평균간섭무늬의 대조도해석에 기초한 진동물체의 비조화진동특성의 정성적인 평가

강정철, 장경훈, 김철수

진동은 각종 전자요소들과 광학기구, 기계가공품들과 설비, 건물과 지반의 특성과 안정상태를 특징짓는 가장 중요한 지표이다.

전자요소들과 음향기구들의 진동특성평가에서 널리 리용하고있는 전형적인 광학적비접촉측정방법은 시간평균간섭법이다. 지금까지 제기된 연구들에서는 일반적으로 진동체가 하나의 주파수로 조화진동을 한다는것을 전제로 하였다.[1, 2]

론문에서는 시간평균간섭무늬의 대조도변화를 해석하여 진동체의 비조화특성을 정성적으로 평가하는 한가지 방법을 제기하였다.

1. 비조화진동이 시간평균간섭무늬의 대조도변화에 주는 영향

일반적으로 2개 광속이 중첩하여 형성한 간섭무늬의 빛세기분포 I는 다음과 같이 쓸수 있다.

$$I = I_0(1+\gamma \cdot \cos\Delta\phi) \tag{1}$$

여기서 I_0은 간섭무늬의 배경빛세기이며 γ는 무늬대조도, $\Delta\phi$는 두 빛파들사이의 위상차이다. 만약 간섭하는 두 빛중 하나가 진동하는 거울에서 반사된것이라면 간섭무늬에는 진동변위에 관계되는 광학적행로차가 추가적으로 반영된다.[3]

물체가 비조화진동을 하는 경우 그것은 각이한 주파수를 가진 진동의 합성으로 보아야 한다.

$$z = \sum_{n=1}^{N} z_n \cos(\omega_n t + \phi_n) \tag{2}$$

이때 시간평균간섭무늬의 대조도변화 M_T는 다음과 같이 일반화할수 있다.

$$M_T = \frac{1}{T}\int_0^T \exp\left[i\sum_{n=1}^{N} \Omega_n \cos(\omega_n t + \phi_n) \right] \tag{3}$$

여기서 $\Omega_n = 4\pi z_n / \lambda$는 최대진동변위에 해당한 위상진폭이다. 이제 해석식

$$\exp(iz\cos\phi) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} i^n J_n(z)\exp(in\phi)$$

를 고려하면 식 (3)의 피적분항은 다음과 같이 쓸수 있다. 여기서 J_n은 1종의 n차베쎌함수이다.

$$\exp\left[i\sum_{n=1}^{N} \Omega_n \cos(\omega_n t + \phi_n) \right] = \prod_{n=1}^{N} \sum_{m=-\infty}^{\infty} i^m J_m(\Omega_n)\exp[im(\omega_n t + \theta_n)]$$

이 식을 피적분항으로 하여 식 (3)을 계산하면 많은 항들이 령으로 되며 시간평균적분은 다음과 같이 간단하게 표시된다.

$$M_T=\sum_{m=1}^{M}\prod_{n=1}^{N} i^{l_{mn}} J_{l_{nm}}(\Omega_n)\exp(il_{nm}\theta_n) \tag{4}$$

여기서 l_{nm}은 다음과 같은 M개 련립대수방정식의 $M\times N$개 풀이를 의미한다.

$$\sum_{n=1}^{N} l_{nm}\omega_n=0 \tag{5}$$

우의 식들은 물체의 진동이 N개 진동들의 중첩으로 이루어진 일반적인 경우를 념두에 둔것이다. 진동체의 모의결과에 의하면 물체의 진동은 대체로 2개 진동수를 가진 진동들의 중첩으로 이루어져있다.

$$z=z_1\cos(\omega_1 t+\phi_1)+z_2\cos(\omega_2 t+\phi_2) \tag{6}$$

물체의 진동은 시간적으로 서로 독립인것과 그렇지 않은 진동들의 합성으로 되여있다.

시간적으로 독립인 진동의 실례로 유리수관계를 가지지 않는 두 진동모드의 합성을 들수 있다. 이것은 두 진동수의 비 ω_1/ω_2가 1/1.3, 1/1.69와 같이 옹근수비로 되지 않을 때이다. 이 경우 식 (3)은 개별적인 특성함수의 적으로써 다음과 같이 표시된다.

$$M_T=J_0(\Omega_1)J_0(\Omega_2) \tag{7}$$

여기서 $\Omega_1=4\pi z_1/\lambda$, $\Omega_2=4\pi z_2/\lambda$이다.

그림 1에 $\lambda=650$nm의 조건에서 1차조화진동의 진폭이 령부터 2 000nm까지 증가할 때 1차진동과 2차진동의 진폭비 z_2/z_1에 따르는 무늬대조도변화를 보여주었다.

그림 1에서 보는것처럼 진폭비가 령부터 0.1사이에 놓일 때 무늬대조도는 령차베쎌함수와 류사하게 변한다. 령차베쎌함수와 공통적인것은 극소점들의 위치와 그것들의 예리한 정도가 같은것이며 차이나는것은 극대봉우리들이 낮아지는것이다. 하지만 진폭비가 보다 커지면 무늬대조도는 령차베쎌함수와 크게 차이난다. 이때에는 무늬봉우리가 크게 달라지는것과 함께 추가적인 극소들이 생겨난다. 그림 1에서 보는것처럼 물체가 비조화진동하는가 하지 않는가, 한다면 두 진폭사이의 크기비가 어느 정도인가 하는것은 극대봉우리들의 높이가 낮아지는 경향성을 보고 쉽게 짐작할수 있다. 그것들의 높이변화의 경향성이 령차베쎌함수와 류사하다면 2차진동성분의 진폭이 1차에 비하여 10분의 1이하로 작다는것을 의미한다. 이때 극소점의 위치는 전혀 변하지 않으므로 령차베쎌함수표와 대비하여 극소점에서 진동변위를 측정할수 있다.

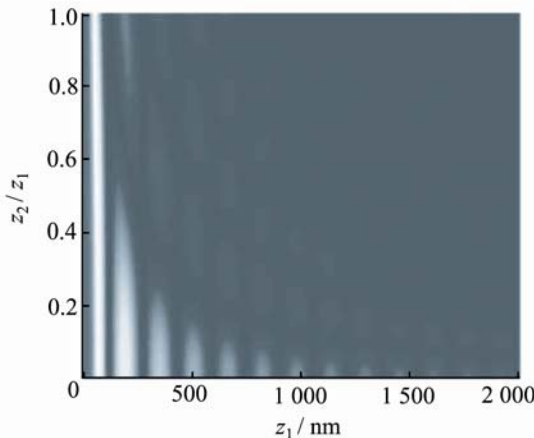


그림 1. 진폭비에 따르는 시간평균무늬대조도의 변화

시간적으로 련관된 진동의 실례로 유리수관계를 가지는 두 진동모드의 합성을 들수 있다. 이것은 두 진동수의 비 ω_1/ω_2가 1/3, 1/5 등과 같이 옹근수비로 될 때이다. 이때 식 (4)는 다음과 같이 표시된다.

$$M_T = \sum_{m_1=-\infty}^{\infty} \sum_{m_2=-\infty}^{\infty} A_{m_1 m_2} i^{m_1+m_2} [J_{m_1}(\Omega_1) J_{m_2}(\Omega_2)] \tag{8}$$

$$A_{m_1 m_2} = \frac{1}{T}\int_0^T \{[f_1 t(f_1^2 - 1)^{1/2}]^{m_1} \cdot [f_2 t(f_2^2 - 1)^{1/2}]^{m_2}\} dt \tag{9}$$

여기서 $f_1 = z_1\cos(\omega_1 t + \phi_1),\ f_2 = z_2\cos(\omega_2 t + \phi_2)$ 이다.

이 경우 무늬대조도는 대단히 복잡하게 변하며 그것은 령차베쎌함수와 크게 차이난다. 그림 2에 진동수비가 각각 1:3, 1:4, 1:5이고 진폭비가 1:5일 때 무늬대조도변화를 보여주었다. 보는것처럼 무늬대조도는 령차베쎌함수(그림에서 점선으로 표시)와 아무러한 련관성도 없다. 지어 극대점의 위치도 완전히 다르며 같은 진동수비관계에 있다고 하여도 진폭비에 따라 대조도모양이 현저하게 달라진다.(그림 3) 실험을 통하여 베쎌함수와 완전히 차이나는 곡선이 얻어졌다면 그것은 곧 물체의 진동에 포함되여있는 두 진동주파수가 유리수관계에 있다는것으로 예측할수 있다. 하지만 그 곡선으로부터 거꾸로 진동수비와 진폭비를 해석하는것은 거의 불가능하다.

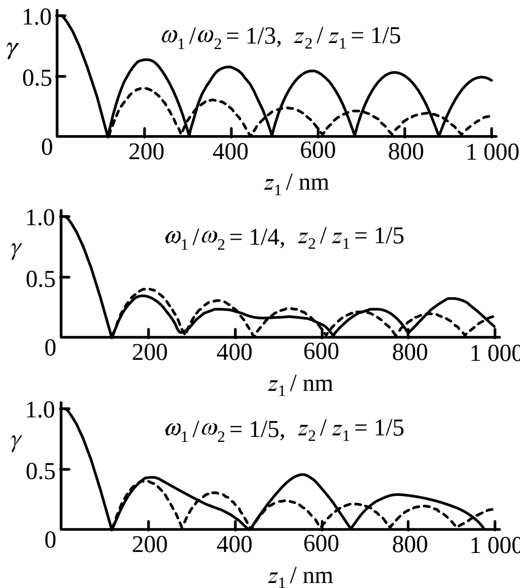


그림 2. 진동수비가 1:3, 1:4, 1:5, 진폭비가 1:5일 때 무늬대조도변화

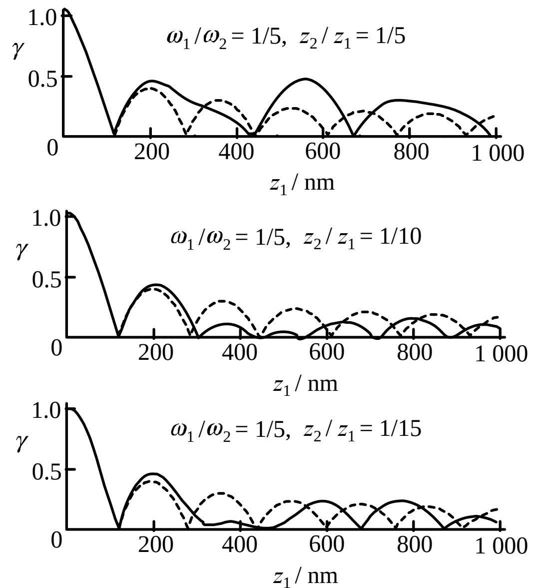


그림 3. 진동수비가 1:5, 진폭비가 1:5, 1:10, 1:15일 때 무늬대조도변화

2. 측 정 결 과

진동측정을 위한 간섭계로 마이클슨간섭계를 리용하였다. 이 간섭계는 빛분할기를 중심으로 기준거울과 측정거울이 일정하게 떨어져있으므로 진동체를 간섭계본체와 분리시키기 쉽다.

론문에서 정한 진동체는 직경이 40mm, 두께가 0.2mm인 황동판에 부착시킨 직경이 25mm, 두께가 0.1mm인 고성기용PZT박막이며 그 중심에 직경이 3mm, 두께가 1mm인 작

은 알루미니움증착광학거울을 고착시켰다.

진동체의 변위특성을 표준급에서 정확하게 평가하려면 외부로부터 진동체에 주는 신호의 세기(실례로 구동전압)를 령부터 점차적으로 변화시키면서 신호 대 진동변위특성을 밝혀야 한다. 론문에서는 한소편콤퓨터기술을 리용하여 수자식가변저항기를 정밀하게 수값조종하는 방식으로 진동체에 가해주는 조화진동신호의 세기를 련속적으로 변화시켰다.

그림 4에 시험진동자에 1 000Hz의 구형파신호를 걸어주고 수자식신호구동장치를 리용하여 구동전압을 0V부터 15V까지 선형으로 서서히 변화시키면서 관측한 무늬대조도변화를 보여주었다.

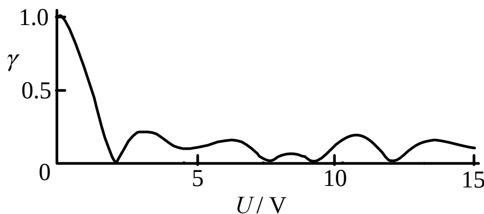


그림 4. 1 000Hz의 구형파구동신호에서 무늬대조도변화

구형파동은 특정한 세기비를 가지고 주파수가 ω, 3ω, 5ω인 유리수관계를 가지는 진동들의 합성으로 볼수 있다. 이 신호를 진동체에 걸어주면 물체는 최소한 ω, 3ω의 주파수를 가지는 진동의 합성으로 진동한다. 이 진동이 바로 그림 4와 같은 무늬대조도변화를 나타낸다. 이 곡선은 령차베쎌함수와 아무러한 련관성도 없으며 이로부터 물체는 시간적으로 련관된 2개이상의 진동의 합성으로 진동한다고 볼수 있다. 이 무늬대조도변화가 정확하게 어떠한 진동에 해당되는가에 대하여서는 해석이 거의 불가능하다. 그러나 그림 4의 대조도변화곡선의 모양으로부터 물체의 조화진동상태에 대하여 그리고 합성진동인 경우 그것이 시간적으로 독립인 혹은 련관된 진동으로 이루어져있는가 하는것은 정확하게 판단할수 있다.

맺 는 말

시간평균간섭무늬의 대조도변화를 통하여 진동체의 비조화진동을 정성적으로 평가할수 있는 한가지 방법을 제기하였다.

비조화진동의 경우 시간평균간섭무늬의 무늬대조도는 대단히 복잡하게 변하며 그것은 령차베쎌함수와 크게 차이난다. 실험에서 베쎌함수와 완전히 차이나는 곡선이 얻어졌다면 그로부터 물체의 조화진동상태에 대하여 그리고 합성진동인 경우 그것이 시간적으로 독립인 혹은 련관된 진동으로 이루어져있는가 하는것은 정확하게 판단할수 있다.

참 고 문 헌

[1] C. Y. Chang et al.; Opt. Lett., 36, 4281, 2011.
[2] C. Y. Chang et al.; Appl. Opt., 51, 24, 5773, 2012.
[3] C. M. Vest; Holographic Interferometry, Wiley, 210～215, 1979.

주체108(2019)년 6월 5일 원고접수

Qualitative Estimation of Non-Harmonic Vibration of Vibrating Object by Contrast Analysis of Time-Averaged Interference Fringe Pattern

Kang Jong Chol, *Jang Kyong Hun* and *Kim Chol Su*

In this paper, we suggested a method for qualitatively estimating non-harmonic vibration of vibrating objects through the contrast variation of time-averaged interference fringe pattern.

The contrast variation of time-averaged interference fringe pattern is very complicated in the case of non-harmonic vibration and varies much from the zero order of the Bessel function of the first kind. From the experimental data which is completely different from the zero order of the Bessel function of the first kind we can easily estimate the harmonic character of vibration, and even the temporal dependency and independency of vibrating modes from simulation results.

Key words: vibration measurement, interferometry

김일성종합대학학보 주체108(2019)년
물리학 제65권 제4호

무늬투영광학계에서 고차다항식근사에 의한 시차와 회전교정의 한가지 방법

백강룡, 김철수

경애하는 최고령도자 **김정은**동지께서는 다음과 같이 말씀하시였다.

《첨단과학기술분야에서 세계적경쟁력을 가진 기술들을 개발하기 위한 투쟁을 힘있게 벌려야 합니다.》

각종 정밀기계가공품들과 광학요소들의 3차원형태측정에서 가장 많이 리용되는것은 무늬투영법이다. 무늬투영광학계에서 투영광학계와 수감광학계의 광축은 물체면과 임의의 각을 이룬다. 따라서 영상에는 시차와 회전이 반드시 포함되며 이것들을 교정하지 않으면 정확한 측정을 할수 없다.[1] 영상의 시차와 회전변환에서 널리 리용하고있는 방법은 행렬변환법이다.[2－4]

론문에서는 화상상관법과 고차다항식근사를 리용하여 시차와 회전을 교정하여 바로선 화상을 얻는 한가지 방법을 제기하였다.

1. 화상상관법에 의한 교정점확정

화상회전은 물체면과 CCD수감면이 평행으로 마주한 경우 두 면에 놓인 자리표축들이 일정한 각을 이루면서 일치하지 않기때문에 생기며 시차는 두 면에 세운 법선들이 각을 이루기때문에 생긴다. 회전결과 모든 영상점들은 영상자리표면의 한곳에 수직으로 세운 특정한 축주위로 일정한 각만큼 회전한것처럼 보인다. 영상광학계의 시차로 하여 수감면에서 영상점들사이의 간격은 선형적으로 변한다.

영상교정에서 나서는 선차적인 문제는 물체면의 실제적인 자리표와 변환된 화상의 자리표사이의 대응관계를 확정하는것이다. 이를 위하여 가장 많이 리용하는 기준물체면은 서양장기판모양의 무늬이다. 그것은 제작이 간단하고 교정을 위한 모서리점들을 쉽게 검출할수 있기때문이다.

론문에서는 기준물체면의 모서리부분화상(그림 1의 ㄱ))과 변형된 기준물체의 영상(그림 1의 ㄴ))사이의 상관연산을 통하여 모서리 교정점들의 위치를 확정하였다. 그림 1의 ㄴ)에서 보는것처럼 기준물체의 변형영상은 시차와 회전을 동시에 나타낸다.

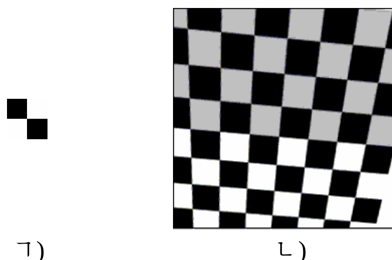

ㄱ) ㄴ)

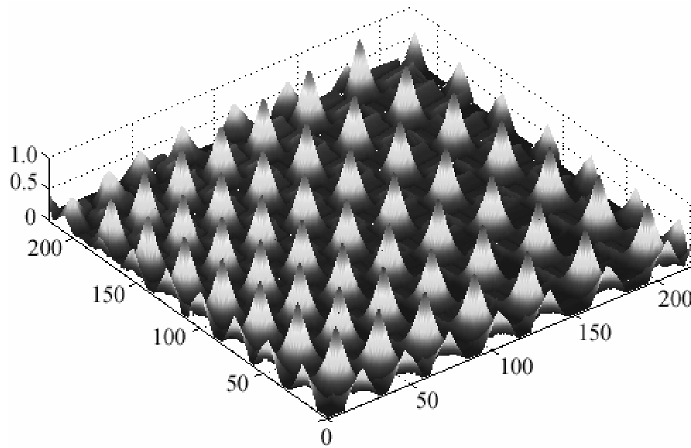
그림 1. 모서리부분화상(ㄱ))과 기준물체의 변형된 영상(ㄴ))

그림 1의 ㄱ)에서 부분화상 $T(p, q)$ 의 크기는 $P\times Q=20\times 20$ 화소이며 교정점을 탐색하려는 변형화상 $S(u, v)$ 의 크기는 $U\times V=220\times 220$ 화소이다. 교정점탐색은 변형물체화상 $S(u, v)$ 에서 부분화상 $T(p, q)$ 를 행 혹은 렬별로 주사하면서 부분화상과

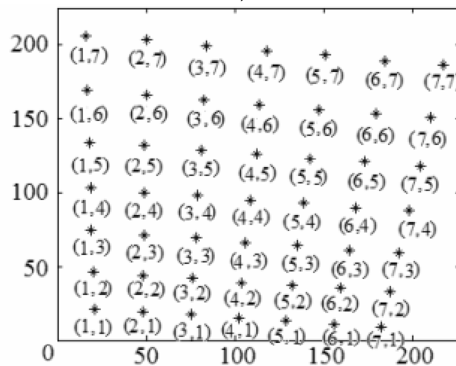
그것이 놓인 위치 (m, n) 에서 변형화상부분(크기 $P \times Q$ 화소)사이의 표준화된 교차상관결수 $R(m, n)$ 을 계산하는 방식으로 진행하였다.

$$R(m, n) = \frac{\sum_u \sum_v S(u, v) T(u-m+(M+1)/2, v-n+(N+1)/2)}{\left[\sum_u \sum_v [S(u, v)]^2\right]^{1/2} \left[\sum_u \sum_v [T(u-m+(M+1)/2, v-n+(N+1)/2)]^2\right]^{1/2}} \quad (1)$$

그림 2에 그림 1의 변형화상과 부분화상사이의 표준화된 교차상관연산결과를 보여주었다. 물체의 변형화상에서 교정점근방의 화상은 시차와 회전효과로 하여 부분화상과 정확하게 일치하지 않으므로 상관결수의 값도 약간씩 차이난다. 하지만 그림 2에서 보는것처럼 교정점근방에서 상관값들은 다른 점들에 비하여 뚜렷한 대조를 이루고있으며 따라서 일정한 화상처리공정을 거치면 그 점들을 비교적 정확하게 확정할수 있다. 론문에서는 턱값처리방식을 적용하여 교정점근방의 구역들을 정하고 무게중심법을 적용하여 교정점들을 확정하였다. 다음으로 매 교정점들에 물체의 정확한 표준자리표들을 대응시켰다. 그림 2에는 상관연산과 무게중심법을 리용하여 그림 1의 실례화상에서 확정한 교정점 (u_i, v_i) 들과 그에 대응하는 표준자리표 (x_i, y_i) 들을 보여주었다.($i = 1, \cdots, k$, k 는 교정점의 개수)



ㄱ)



ㄴ)

그림 2. 주사식상관연산결과(ㄱ))와 무게중심법을 리용하여 확정한 교정점들에 대응하는 표준자리표(ㄴ))

2. 고차다항식근사에 영상의 시차와 회전교정

사실 화상 $S(u, v)$는 초기화상(원화상) $C(x, y)$가 광학계의 설치조건으로 인한 시차와 회전으로 하여 변형된것이다. 시차와 회전에 대한 해석적인 식의 파라메터들을 조종하면 $C(x, y)$를 임의로 변화시켜 각이한 류형의 화상 $S(u, v)$를 얻을수 있다. 이것은 광학계를 통하여 일단 변형된 화상을 바로잡으려면 두 화상사이의 자리표 $(u, v), (x, y)$ 사이의 관계를 밝혀야 한다는것을 의미한다.

$$x = f_x(u, v),\ \ y = f_y(u, v) \tag{2}$$

변형화상에 시차와 회전이 동시에 포함되여있는 경우 두 자리표사이의 관계는 2차까지의 다항식으로 표시할수 있다.[1]

$$\left.\begin{aligned} x &= a_0 + a_1u + a_2v + a_3u^2 + a_4uv + a_5v^2 \\ y &= b_0 + b_1u + b_2v + b_3u^2 + b_4uv + b_5v^2 \end{aligned}\right\} \tag{3}$$

론문에서는 주사식상관연산으로 확정한 교정점 (u_i, v_i)와 그에 대응시킨 표준자리표 (x_i, y_i) 사이의 2차다항식의 결수들을 최소2제곱법으로 결정하고 (u, v)에서의 색값을 (x, y)에서의 색값으로 넘기는 방법으로 교정된 화상 $C(x, y)$를 얻었다. 실례로 다음의 값들은 그림 2의 자료로부터 결정한 2차다항식의 결수들이다.

a_0=0.042 6, a_1=0.043 9, a_2=0.002 89, a_3=−6.48×10^{-5}, a_4=−5.65×10^{-6}, a_5=4.79×10^{-6}

b_0=0.189, b_1=0.002 19, b_2=0.037 9, b_3=−3.7×10^{-6}, b_5=−5.24×10^{-5}, b_5=−1.78×10^{-6}


그림 3. 교정된 화상

그림 3에 우에서 보여준 결수들과 식 (3)에 기초하여 결정한 자리표계에서 교정한 화상을 보여주었다.

그림 3에서 보는것처럼 상관연산으로 교정점의 자리표들을 결정하고 고차다항식근사법으로 변형화상과 교정점들사이의 관계를 확정하면 시차와 회전으로 외곡된 화상을 정확하게 교정할수 있다. 실지 환경에서는 광학계의 수차와 물체의 놓임방식에 따라 화상이 보다 심하게 외곡될수 있지만 이 방법을 리용하면 그것을 간단하게 교정할수 있다.

맺 는 말

화상상관법과 고차다항식근사를 리용하여 시차와 회전으로 하여 변형된 화상을 교정하는 한가지 방법을 제기하였다.

장기판모양의 기준물체면의 모서리부분화상과 변형된 물체영상사이의 상관연산을 통하여 모서리교정점들의 위치를 확정하였다. 교정점들과 그에 대응시킨 표준자리표사이의 2원2차다항식의 결수들을 최소2제곱법으로 결정하는 방법으로 바로 선 화상을 얻었다.

참 고 문 헌

[1] W. K. Pratt; Digital Image Processing, John Wiley & Sons, 613～637, 2001.
[2] J. S. Geng; Advances in Optics and Photonics, 3, 128, 2011.
[3] J. H. Huang et al.; Optical Engineering, 52, 4, 043602, 2013.
[4] T. Eckhard et al.; Applied Optics, 53, 17, 3764, 2014.

주체108(2019)년 6월 5일 원고접수

A Method for Correction of Image Rotation and Parallax by Polynomial Fitting in Fringe Projection System

Paek Kang Ryong, Kim Chol Su

We presented a method for correction of images deformed from rotation and parallax by using image correlation and polynomial fitting.

The correction points can be decided by correlation between corner images of a chessboard-shaped reference and its deformed image. The upright image can be obtained by determining the coefficients of 2 dimensional polynomials between the correction points the reference coordinates corresponding to them with least square.

Key words: digital image processing, correction of aberration, image correlation

김일성종합대학학보 주체108(2019)년
물리학 제65권 제4호

1차원표면플라즈몬도파관과 결합된 세량자점계에서 발생하는 얽힘특성

렴주성, 고명철, 김남철

빛량자들이 정보나르개로 광범히 리용되면서 발전하기 시작한 량자정보처리기술은 오늘날 사람들이 예견하지 못하였던 놀라운 결과들을 내놓으면서 많은 나라들의 관심을 모으고있다.[1] 빛량자들사이의 호상작용이 약하고 전파속도가 빠르기때문에 이것을 정보나르개로 리용하면 량자통신[2]이나 량자계산[3]을 비롯한 량자정보처리를 실현할수 있는데 여기서 중요한 문제는 빛량자들의 량자상태를 조종하고 그것을 안전하게 멀리 전송하는것이다. 최근에 1차원적으로 배렬된 공진기렬[4], 빛량자결정[5], 금속－유전체경계면[6]에서와 같이 도파관을 량자계와 결합시켜 빛량자의 전송을 조종하거나 량자계들사이의 얽힘특성을 조종할수 있다는것이 알려졌다. 1차원도파관을 리용하면 빛량자를 에돌이한계이하에서도 전송시킬수 있으며 이것을 리용하여 단일빛량자3극소자, 빛스위치, 단일빛량자원천 등과 같은 나노대역에서의 량자장치들을 개발할수 있다. 또한 량자계들사이의 높은 얽힘을 형성하고 그것을 조종하면 량자론리문을 구성하여 량자콤퓨터나 량자알고리듬을 실현할수 있다.[7] 선행연구들에서는 량자계들사이의 얽힘특성을 조종하기 위하여 다립자계의 얽힘을 연구하였지만 거기에서는 량자계들사이의 호상작용만을 론의하였다.[8] 1차원도파관을 리용하는 경우에도 량자점이 2개인 경우에로 문제를 귀착시키고 도파관을 리용하여 다립자계의 얽힘특성을 조종하기 위한 문제를 설정하지 못하였다.[9]

론문에서는 1차원도파관과 결합된 다립자계의 얽힘특성을 실공간방법을 리용하여 리론적으로 해석하였다. 여기서는 동시발생도를 리용하여 1차원도파관을 통하여 호상작용하는 량자점들의 얽힘정도를 정량적으로 평가하였으며 량자점들사이의 거리, 입사주파수와 량자점들의 이행주파수와의 탈조, 량자점들과 도파관사이의 결합을 리용하여 얽힘특성을 조종할수 있다는것을 밝혔다.

1. 리론적모형과 동력학적방정식

금속나노선인 1차원표면플라즈몬도파관과 결합된 등간격 및 비등간격으로 놓여있는 3개의 량자점으로 이루어진 나노계에서 발생하는 얽힘을 고찰해보자.(그림 1)

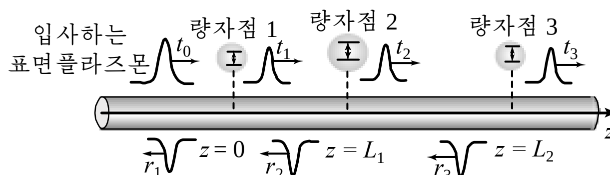


그림 1. 1차원표면플라즈몬도파관과 3개의 량자점들로 이루어진 나노계의 모형

회전파근사를 리용하면 실공간방법에서 계의 하밀토니안은 다음과 같이 주어진다.[4]

$$H=\sum_{j=1}^{3}[(\omega_e^{(j)}-i\Gamma_j'/2)\sigma_{ee}^j+\omega_g^{(j)}\sigma_{gg}^j]+iv_g\int_{-\infty}^{\infty}dz[a_l^+(z)\partial_z a_l(z)-a_r^+(z)\partial_z a_r(z)]+$$
$$+\sum_{j=1}^{3}g_j\{[a_r^+(z_j)+a_l^+(z_j)]\sigma_{ge}^j+[a_r(z_j)+a_l(z_j)]\sigma_{eg}^j\} \quad (1)$$

여기서 $\omega_e^{(j)}$와 $\omega_g^{(j)}$는 각각 j번째 량자점의 상태 $|g\rangle$와 $|e\rangle$의 고유주파수이고 ω_k는 파수 $k(\omega_k=v_g|k|)$를 가지고 전파하는 입사플라즈몬의 주파수이다. $\sigma_{eg}^j=|e\rangle_{j\,j}\langle g|$ $(\sigma_{ge}^j=|g\rangle_{j\,j}\langle e|)$는 j번째 량자점의 상승(하강)연산자이고 $a_r^+(z_j)(a_l^+(z_j))$는 j번째 량자점이 있는 위치 z_j에서 오른쪽(왼쪽)으로 전파하는 표면플라즈몬을 발생시키는 보존연산자이다. v_g는 ω_k에 대응하는 군속도이고 비에르미트성분 Γ_j'는 다른 모든 통로에로의 붕괴속도를 가진 상태 $\omega_e^{(j)}$의 붕괴률을 나타낸다. $g_j=(2\pi\hbar/\omega_k)^{1/2}\Omega_j\boldsymbol{D}_j\cdot\boldsymbol{e}_k$는 j번째 량자점과 단일표면플라즈몬과의 결합상수이고 Ω_j는 j번째 량자점의 공명에네르기이며 $\boldsymbol{D}_j$는 j번째 량자점의 2중극모멘트, $\boldsymbol{e}_k$는 표면플라즈몬의 편극단위벡토르이다.[5] 단일표면플라즈몬이 에네르기 $E_k=\hbar\omega_k$를 가지고 왼쪽으로부터 입사한다고 하면 정상상태의 슈뢰딩게르방정식 $H|\psi_k\rangle=E_k|\psi_k\rangle$에 의하여 정의된 계의 고유상태는 다음의 형식으로 구성된다.

$$|\psi_k\rangle=\int dz[\phi_{k,\,r}^+(z)a_r^+(z)+\phi_{k,\,l}^+(z)a_l^+(z)]|0,\,g\rangle+\sum_{j=1}^{3}e_k^{(j)}|0,\,e_j\rangle \quad (2)$$

여기서 $|0,\,g\rangle$는 플라즈몬이 하나도 없는 진공상태와 량자점들이 려기되지 않은 상태를 표시하며 $|0,\,e_j\rangle$는 마당이 진공상태이고 오직 j번째 량자점만이 려기된 상태를 나타내며 $e_k^{(j)}$는 려기된 상태에서 j번째 량자점의 확률진폭을 나타낸다. $\phi_{k,\,r}^+(z)(\phi_{k,\,l}^+(z))$는 위치 z에서 오른쪽(왼쪽)으로 전파하는 표면플라즈몬의 파동함수를 나타낸다.

왼쪽으로부터 입사하는 플라즈몬에 대하여 모드함수들에 대한 경계조건 ($t_0+r_1=t_1e^{-ikL_1}+r_2e^{ikL_1}$, $t_1+r_2=t_2e^{-ikL_2}+r_3e^{ikL_3}$, $t_2+r_3=t_3e^{-ik(L_1+L_2)}+r_4$, 여기서 $t_0=1$, $r_4=0$)과 슈뢰딩게르방정식을 리용하면 투과 및 반사진폭과 확률진폭을 얻는다.

량자계들사이의 얽힘을 정량적으로 나타내는 동시발생도 $C_{12}=\dfrac{2|e_k^{(1)}|\cdot|e_k^{(2)}|}{|e_k^{(1)}|^2+|e_k^{(2)}|^2+|e_k^{(3)}|^2}$, $C_{23}=\dfrac{2|e_k^{(2)}|\cdot|e_k^{(3)}|}{|e_k^{(1)}|^2+|e_k^{(2)}|^2+|e_k^{(3)}|^2}$ 을 평가하여 2개의 량자점들사이에 이루어지는 얽힘특성을 평가할수 있다.

세량자점계를 두 부분으로 나누어 생각할 때 1개의 량자점과 나머지 2개의 량자점사이에 이루어지는 얽힘특성도 고찰할수 있다. 이것은 다음의 식으로 평가할수 있다.

$$C_{1,\,23}=\frac{2|e_k^{(1)}|\cdot\sqrt{|e_k^{(2)}|^2+|e_k^{(3)}|^2}}{|e_k^{(1)}|^2+|e_k^{(2)}|^2+|e_k^{(3)}|^2},\quad C_{3,\,12}=\frac{2|e_k^{(3)}|\cdot\sqrt{|e_k^{(1)}|^2+|e_k^{(2)}|^2}}{|e_k^{(1)}|^2+|e_k^{(2)}|^2+|e_k^{(3)}|^2}$$

2. 리론적해석과 수값결과

1차원도파관과 결합된 량자점들사이의 얽힘특성을 량자점이 2개인 경우[9]와 3개인 경우와의 대비속에서 평가하자. 모든 계산에서 감쇠를 무시할수 있고 $g_j^2/v_g \equiv J_j$, $J_1 = J_2 = J_3 = J$ 라고 가정한다.

그림 2에 량자점들사이의 위상에 따르는 2개의 량자점인 경우(ㄱ))의 동시발생도와 3개의 량자점이 등간격으로 배치되여있는 경우에 첫 두 량자점(ㄴ))과 마지막 두 량자점(ㄷ))사이의 동시발생도를 보여주었다. 그림 2에서 알수 있는것처럼 량자점사이의 동시발생도는 위상 π를 주기로 하여 주기적인 특성을 나타낸다. 그림 2의 ㄱ)에서 보는것처럼 량자점이 2개인 계의 경우에는 위상이 π인 근방에 2개의 봉우리가 있지만 그림 2의 ㄴ)에서 보는것처럼 량자점이 3개인 계의 경우에는 3개의 봉우리가 있다. 이것은 량자계가 많아질수록 량자점들사이에서 높은 동시발생도를 가진 얽힘특성이 나타난다는것을 보여준다. 또한 량자계들사이의 얽힘절환을 실현하는데서도 다립자계가 두량자점계의 경우보다 더 편리하다는것을 알수 있는데 이러한 결과들은 량자정보처리에서 정보원천을 형성하는데 널리 리용할수 있다.

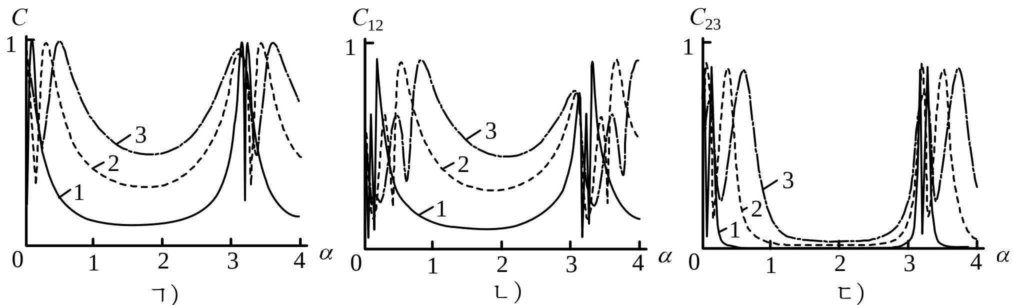


그림 2. 량자점이 2개(ㄱ)), 3개(ㄴ), ㄷ))인 계에서 두 량자점들사이의 동시발생도
1－3은 각각 $\delta = 0.1,\ 0.3,\ 0.5J$ 인 경우

그림 3에 3개 량자점계에서 한 량자점과 나머지 2개의 량자점사이에 발생하는 두부분얽힘특성에 대하여 2개의 량자점만 있는 경우와 대비하여 보여주었다. 그림 3을 통하여 알수 있는것처럼 다립자계의 두부분얽힘특성도 위상이 π인 근방에서 두량자점계의 경우보다 많은 봉우리특성을 나타내며 봉우리들사이에는 넓은 위상구간에 대하여 높은 얽힘을 보장할수 있다는것을 알수 있다. 이러한 특성은 량자점과 입사플라즈몬사이의 탈조량이 증가할수록 더욱 뚜렷하게 나타나며 특히 그림 3의 ㄷ)에서 볼수 있는바와 같이 탈조량이 $\delta = 0.5J$ 일 때 많은 구간에서 동시발생도가 거의 1에 가까운 높은 얽힘이 이루어진다. 량자정보처리에서 량자점들은 단일포톤을 발생시키거나 포톤들을 저장하는데 많이 리용되는데 이런 량자점들사이의 높은 얽힘을 보장하는것은 정보전달과 량자계산을 위한 량자론리문구성에서 중요한 요구로 나선다.

이러한 결과들은 광대역위상구간에서의 높은 얽힘을 보장할수 있게 하는것으로 하여 량자계산이나 량자통신에 유용하게 리용할수 있다.

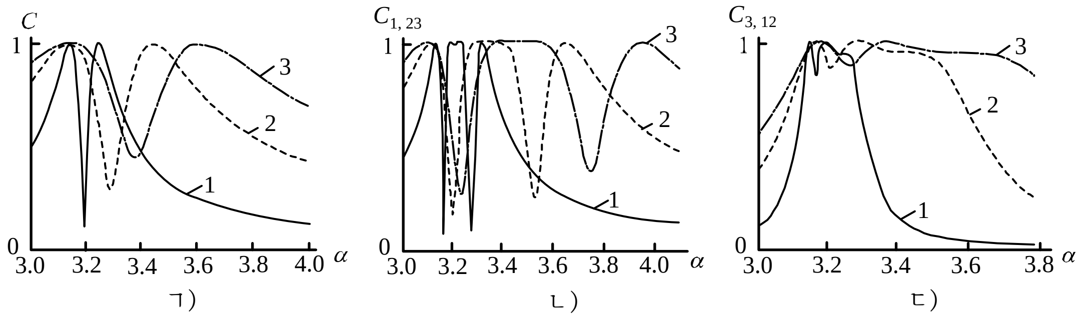


그림 3. 량자점이 2개(ㄱ)), 3개(ㄴ), ㄷ))인 계에서 두부분얽힘의 동시발생도
1－3은 그림 2에서와 같음

마지막으로 1차원도파관과 결합된 3개의 량자점이 비등간격으로 배치되여있을 때 두 량자점들사이의 얽힘특성과 두부분얽힘특성에 대하여 보기로 하자. 그림 4에 첫 두 량자점사이의 위상을 $\pi/2$로 고정시켰을 때 마지막 두 량자점들사이의 위상에 따르는 동시발생도를 보여주었다. 그림 4에서 보는것처럼 탈조량이 증가할수록 봉우리의 폭은 넓어지면서 오른쪽으로 편기된다는것을 알수 있다. 특히 모든 경우에 대하여 탈조량이 $\delta = 0.1J$ 일 때 얽힘특성은 좋은 절환효과를 나타낸다. 특히 그림 3의 ㄷ)와 ㄹ)에서 볼수 있는바와 같이 0과 π근방에서 동시발생도가 거의 1에 가까운 높은 얽힘과 낮은 얽힘사이의 절환효과가 발생한다.

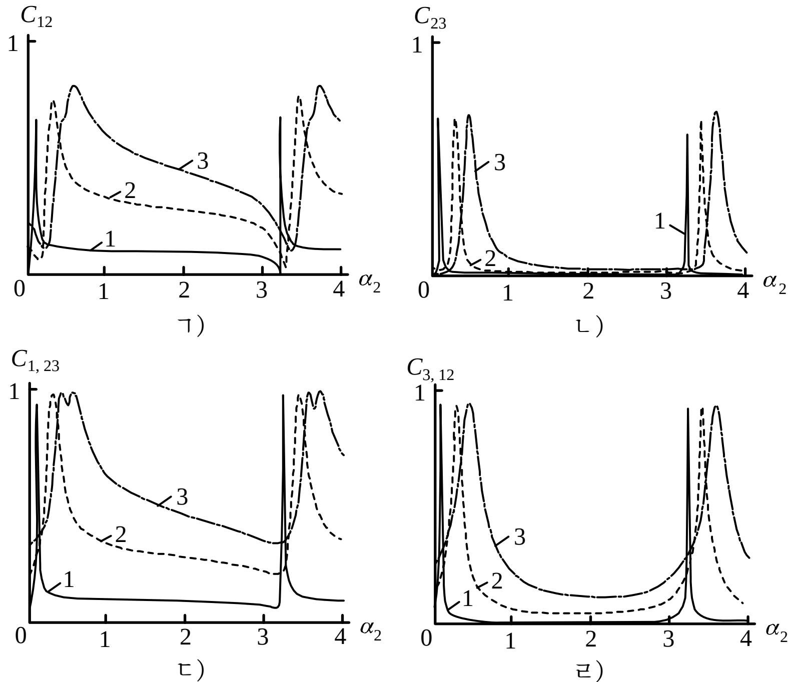


그림 4. $\alpha_1 = \pi/2$ 인 경우 비등간격배치의 세량자점계에서 동시발생도
1－3은 그림 2에서와 같음

맺 는 말

론문에서는 1차원도파관과 결합된 다립자계의 얽힘특성을 동시발생도를 가지고 정량적으로 연구하였다. 량자정보처리에서 중요한 문제의 하나로 나서고있는 량자계들사이의 얽힘특성조종을 1차원도파관과 량자계들을 결합시킴으로써 량자계와 도파관사이의 결합, 량자계의 이행주파수와 외부마당과의 탈조량, 량자계들사이의 거리를 비롯한 여러가지 파라메터들을 리용하여 실현할수 있다는것을 보여주었다. 특히 다립자계의 두부분얽힘은 두량자점계를 리용할 때보다 높고 절환효과도 좋은 특성을 가진다.

참 고 문 헌

[1] S. Haroche; Rev. Mod. Phys., 85, 1083, 2013.
[2] Z. T. Liang et al.; Phys. Rev., A 89, 062312, 2014.
[3] G. Vallone et al.; Phys. Rev. Lett., 115, 040502, 2015.
[4] H. Walther et al.; Rep. Prog. Phys., 69, 1325, 2006.
[5] L. Carziano et al.; Phys. Rev. Lett., 117, 043601, 2016.
[6] P. Yao et al.; Opt. Express, 17, 11505, 2009.
[7] S. Mahmoodian et al.; Phys. Rev. Lett., 117, 240501, 2016.
[8] T. J. Osborne1 et al.; Phys. Rev. Lett., 96, 220503, 2006.
[9] C. G. Ballestero et al.; Phys. Rev., A 89, 042328, 2014.

주체108(2019)년 6월 5일 원고접수

Properties of Entanglement Created in Three-QD System Coupled to 1D Surface Plasmonic Waveguide

Ryom Ju Song, *Ko Myong Chol* and *Kim Nam Chol*

We investigated theoretically the properties of the entanglement created in the three quantum dots(QDs) system coupled to one dimensional surface plasmonic waveguide via the real-space approach. High entanglement of the QDs could be achieved by adjusting the interparticle distance of the QDs and detuning.

Key words: quantum dot, quantum entanglement, plasmonic waveguide

김일성종합대학학보 주체108(2019)년
물리학 제65권 제4호

태양의 상층채구와 코로나에서의 비등온자기 정적평형에 관한 한가지 모형

황신철, 최철민

위대한 령도자 **김정일**동지께서는 다음과 같이 교시하시였다.

《지구우에 존재하는 모든 생명체와 자연현상은 태양의 영향을 크게 받고있습니다. 그러므로 인간생활과 직접 잇닿아있는 태양부터 잘 연구하여 태양의 변화를 미리 예견하고 그것을 사람들에게 알려주어야 합니다.》(《**김정일**전집》 제3권 380페지)

흑점과 홍염과 같은 태양대기에 존재하는 활동요소들을 모형화하기 위한 많은 연구들[1, 2]에서는 균일중력마당속에 있는 2차원플라즈마의 자기정적평형을 가정하였다. 특히 태양의 상층채구와 코로나에 존재하는 가장 거대한 태양활동요소인 고요한 홍염을 모형화하기 위한 선행연구들[3, 4]에서는 수학적단순화를 위하여 온도 T를 상수로 가정하였다.

고요한 홍염이 주위의 플라즈마보다 낮은 온도를 가지며 높이에 따라 온도가 변한다는 X선 및 자외선관측결과[5]를 고려하여 론문에서는 2차원플라즈마의 비등온자기정적평형을 표시하는 일반화된 방정식들을 유도하고 그 물리적의미를 밝혔다.

1. 출발방정식과 비등온자기정적평형문제에로의 일반화

균일중력마당속에 있는 플라즈마의 물리적상태를 표시하는 자기정적평형방정식은 다음과 같다.[2]

$$\frac{1}{4\pi}(\nabla\times\boldsymbol{B})\times\boldsymbol{B}-\nabla P-\rho g\hat{z}=0 \tag{1}$$

여기서 $\boldsymbol{B}(x)$는 자기마당, $P(x)$는 기체압력, $\rho(x)$는 기체밀도, g는 z축의 부방향에로의 균일중력가속도이다.

태양대기는 다음의 리상기체법칙을 늘 만족시킨다고 가정한다.

$$P=\frac{\rho kT}{m} \tag{2}$$

여기서 m은 기체의 평균분자량, k는 볼츠만상수, $T(x)$는 기체의 온도이다.

식 (2)를 리용하면 방정식 (1)은 다음과 같이 변형된다.

$$\frac{1}{4\pi}(\nabla\times\boldsymbol{B})\times\boldsymbol{B}-\nabla P-\frac{hT_0P\hat{z}}{T}=0 \tag{3}$$

여기서

$$h=\frac{mg}{kT_0} \tag{4}$$

는 기체의 전형적온도 T_0에 해당한 등온대기높이이다.

식 (3)에서 T=일정이라고 놓으면 1개 독립변수를 가지는 편미분방정식으로 넘어간다.

여기서는 T=일정이라는 가정이 없이 2차원자기정적평형문제를 다음과 같이 고찰하겠다.

먼저 모든 물리적량들이 y와 z에만 의존하는 경우를 가정하자. 이 경우에 자기마당 $\boldsymbol{B}(y, z)$ 를 다음과 같이 표시할수 있다.

$$\boldsymbol{B}(y, z) = \left(B, \frac{\partial A}{\partial z}, -\frac{\partial A}{\partial y} \right) \tag{5}$$

여기서 $A(y, z)$ 와 $B(y, z)$ 는 스칼라함수들이며 따라서 식 (5)는 $\text{div}\boldsymbol{B} = 0$ 을 나타낸다. 또한 자기마당선들은 $A(y, z)$ =일정을 만족시키도록 yz 평면에로 사영할수 있다.

이제 다음과 같은 본이 없는 량들을 받아들이자.

$$\left.\begin{aligned} & Y = hy,\ Z = hz \\ & A(y, z) = A_0 F(Y, Z),\ B(y, z) = B_0 G(Y, Z) \\ & P(y, z) = P_0 P(Y, Z),\ T(y, z) = T_0 L(Y, Z) \end{aligned}\right\} \tag{6}$$

여기서 h는 식 (4)에 의해 정의되며 A_0, B_0, P_0, T_0 은 상수들이다.

이 본이 없는 량들에 의하여 방정식 (3)은

$$\frac{\partial(F, G)}{\partial(Y, Z)} = 0 \tag{7}$$

$$\nabla^2 F \frac{\partial F}{\partial Y} + \gamma G \frac{\partial G}{\partial Y} + \beta \frac{\partial P}{\partial Y} = 0 \tag{8}$$

$$\nabla^2 F \frac{\partial F}{\partial Z} + \gamma G \frac{\partial G}{\partial Z} + \beta \frac{\partial P}{\partial Z} + \beta \frac{P}{L} = 0 \tag{9}$$

으로 표시된다. 여기서

$$\beta = \frac{4\pi P_0}{h^2 A_0^2},\ \gamma = \frac{B_0^2}{h^2 A_0^2} \tag{10}$$

이다.

식 (7)은 $G(Y, Z)$ 가 $F(Y, Z)$ 의 함수로 표시될수 있다는것 즉 $G(Y, Z) = G(F(Y, Z))$ 를 보여준다.

따라서 식 (8), (9)는 다음과 같이 변형된다.

$$[\nabla^2 F + \gamma G(F) G'(F)] \frac{\partial F}{\partial Y} + \beta \frac{\partial P}{\partial Y} = 0 \tag{11}$$

$$[\nabla^2 F + \gamma G(F) G'(F)] \frac{\partial F}{\partial Z} + \beta \frac{\partial P}{\partial Z} + \beta \frac{P}{L} = 0 \tag{12}$$

여기로부터 또한 다음의 식을 얻을수 있다.

$$\frac{\partial(P, F)}{\partial(Y, Z)} - PL^{-1} \frac{\partial F}{\partial Y} = 0 \tag{13}$$

식 (13)은 매개 자기마당선에 따르는 힘평형을 나타낸다.

다음으로

$$P(Y, Z) \equiv P(F, Z),\ L(Y, Z) \equiv L(F, Z) \tag{14}$$

를 가정하겠다. 물리적으로 식 (14)는 임의의 주어진 자기마당선에 대하여 $F(Y, Z) =$ 일정에 따르는 온도와 압력을 높이 z에 따라 변하는 량들로 변형한다. 식 (14)를 (13)에 대입

하면 다음식이 얻어진다.

$$\left[\frac{\partial P(F, Z)}{\partial Z} + \frac{P(F, Z)}{L(F, Z)}\right]\frac{\partial F}{\partial Y} = 0 \tag{15}$$

일반적으로 $\frac{\partial F}{\partial Y} \neq 0$ 이며 따라서 다음의 식을 얻을수 있다.

$$\frac{\partial \ln(P(F, Z))}{\partial Z} = -L(F, Z)^{-1} \tag{16}$$

또는

$$P(Y, Z) \equiv P(F, Z) = P_0 \exp\left[-\int_0^z \frac{dz'}{L(F, z')}\right] \tag{17}$$

이다. 여기서 $P_0(F)$ 는 미정함수이다.

식 (17)에 의해 주어지는 압력을 리용하면 식 (11), (12)는 다음과 같은 단일비선형타원편미분방정식으로 변형할수 있다.

$$\nabla^2 F + \frac{\partial}{\partial F}\left[\frac{1}{2}\gamma(G(F))^2 + \beta P_0(F)\exp\left(-\int_0^z \frac{dz'}{L(F, z')}\right)\right] = 0 \tag{18}$$

만일 $G(F), P_0(F), L(F, Z)$ 를 안다면 2차원플라즈마의 자기정적문제는 스칼라함수 $F(Y, Z)$ 에 관하여 식 (18)을 푸는것에 귀착된다.

그러면 밀도, 압력, 온도, 자기마당은 식 (2), (5), (6), (14), (17)을 리용하면 풀이 $F(Y, Z)$ 에 의해 다음과 같이 표시된다.

$$\left.\begin{aligned}
&\rho(y, z) = \rho_0 L(F(Y, Z))^{-1} P_0(F(Y, Z))\exp\left(-\int_0^z \frac{dz'}{L(F(Y, Z), z')}\right)\\
&\rho_0 = mP_0 / kT_0\\
&P(y, z) = P_0 P_0(F(Y, Z))\exp\left(-\int_0^z \frac{dz'}{L(F(Y, Z), z')}\right)\\
&T(y, z) = T_0 L(F(Y, Z), Z)\\
&B(y, z) = A_0 h\left[\gamma^{1/2} G(F(Y, Z)), \frac{\partial F}{\partial Z}, -\frac{\partial F}{\partial Y}\right]
\end{aligned}\right\} \tag{19}$$

곡선 $\frac{\partial F(Y, Z)}{\partial Y} = 0$ 에 의해 분리된 공간의 구역들은 식 (18)에서 $P_0(F)$ 와 $L(F, Z)$ 의 각이한 함수형태에 대응될수 있다. 이때 공간의 매 구역에 대한 $P_0(F)$ 와 $L(F, Z)$ 의 함수형태의 선택은 경계조건 $\frac{\partial F(Y, Z)}{\partial Y} = 0$ 과 공간의 린접한 지역들에서 압력과 온도가 원활하게 련속이여야 한다는 요구를 만족시켜야 한다. 가장 단순한 경우는 $P_0(F)$ 와 $L(F, Z)$ 의 동일한 함수형태가 공간의 모든 지역들에 적용되는것인데 이 경우 자기마당선 $F(Y, Z)$ =일정에 놓이며 같은 높이에 있는 임의의 두 점은 동일한 온도와 압력을 가진다.

2. 2차원자기정적평형문제의 특수풀이와 해석

먼저 식 (18)의 특수경우를 보기로 하자.

등온의 경우에 $L(F, Z)$=1로 놓을수 있으며 이때 식 (18)은 다음과 같이 표시된다.

$$\nabla^2 F + \gamma G(F)G'(F) + \beta P_0'(F)e^{-z} = 0 \tag{20}$$

일부 고요한 홍염모형들은 함수 $P_0(F)$의 특정한 선택과 조건 $G(F)=0$을 가정했을 때 식 (20)으로부터 얻어지는 단순화된 식을 출발방정식으로 하여 전개되였다.

홍염자기마당이 일반적으로 홍염길이에 따르는 성분을 가진다는 일부 관측결과들의 관점에서 보다 실제적인 등온홍염모형들은 $G(Y) \neq 0$을 만족시켜야 한다.

식 (18)에서 기체압력을 무시하면 또 하나의 특수경우가 주어진다.

1차근사로서 $P_0(F)$=0을 설정하면 식 (20)은 다음과 같이 표시된다.

$$\nabla^2 F + \gamma G(F)G'(F) = 0 \tag{21}$$

이것은 다음의 잘 알려진 방정식과 등가이다.

$$\nabla \times \boldsymbol{B} = \alpha \boldsymbol{B} \tag{22}$$

여기서 $\alpha(x)$는 자기마당선의 꼬임을 나타낸다.[4]

식 (21)과 (22)를 비교하고 식 (5)를 리용함으로써 다음의 식을 유도할수 있다.

$$\alpha(Y, Z) = -h\gamma^{1/2}G'(F) \tag{23}$$

따라서 $B(y, z)$의 x성분 즉 $G(F)$는 자기마당선의 꼬임을 결정한다.

결국 물리적으로 $P_0(F)$와 $G(F)$는 각각 자기마당선 $F(Y, Z)$=일정에 포함된 물질의 량과 자기마당선의 꼬임을 나타내며 필요에 따라 이 두 량이 평형상태가 발달된 초기홍염의 상태에만 의존한다고 가정할수도 있다.

이와 같이 $P_0(F)$와 $G(F)$는 임의로 구체화될수 있으며 에네르기수송을 무시한 운동학적문제에서는 같은 방식으로 $L(F, Z)$의 함수형태 역시 임의로 정할수 있다. 그렇지 않으면 $L(F, Z)$는 수송방정식외에 식 (18)을 만족시키는 알려지지 않은 량으로 취급되여야 한다.

함수형태가 알려지지 않은 $L(F, Z)$를 포함하는 에네르기수송방정식과 방정식 (18)의 완전한 풀이에 대해서는 앞으로 더 연구하여야 한다.

$L(F, Z)$를 적당히 선택하면 일정한 조건에서 물리적으로 의의있는 태양상층채구 및 코로나에서 비등온자기정적평형륜곽을 유도할수 있을뿐아니라 그것을 고요한 홍염에서 관측되는 온도변화의 원인으로 되는 에네르기이동을 모형화하는데도 리용할수 있다.

맺 는 말

태양의 상층채구와 코로나에 존재하는 고요한 홍염에 관한 한가지 비등온모형을 제기하고 균일중력마당속에 있는 2차원플라즈마의 비등온자기정적평형에 대한 일반화된 방정식을 유도하였으며 그 물리적의미를 밝혔다.

참 고 문 헌

[1] 김일성종합대학학보(자연과학), 50, 4, 60, 주체93(2004).
[2] E. Hassen et al.; Solar Phys., 178, 41, 1999.
[3] D. E. Gray et al.; Solar Phys., 294, 114, 2013.
[4] L. GalluB et al.; Astrophysical J., 737, 134, 2015.
[5] E. Chaisson et al.; Astronomy Today, Addison-Wesley, 393～412, 2013.

주체108(2019)년 6월 5일 원고접수

A Model of Non-Isothermal Magnetohydrostatic Equilibrium in Upper Chromosphere and Corona of the Sun

Hwang Sin Chol, Choe Chol Min

In this paper, we derived the generalized equation for non-isothermal magnetohydrostatic equilibrium of 2-dimensional plasma in the presence of homogeneous gravitational field and discussed its physical meaning.

Key words: prominence, model, solar corona

Ti_4O_7의 전자상태에 대한 제1원리적연구

리문혁, 김경일

이산화티탄(TiO_2)은 빛촉매, 빛전지, 전자공학을 비롯하여 여러 분야에서 널리 리용된다.[1] 가장 대표적인 응용은 물을 산소와 수소로 분해하는 반응에 대한 빛촉매작용이다.[2] 그러나 TiO_2에 대하여 실험적으로 측정한 금지띠값은 금홍석형에서는 3.0eV, 예추석형에서는 3.2eV로서 넓은 범위의 태양빛을 효과적으로 리용할수 없다.

보임빛대역에 대한 빛흡수률을 높이기 위하여 금지띠폭을 줄여야 한다. 산소결핍형 이산화티탄(아산화티탄 Ti_nO_{2n-x})을 리용하면 금지띠폭을 줄일수 있다. 여기서 n=2인 경우는 강옥형, n>2인 경우는 마그넬리형으로 구분한다. 이 물질들은 금지띠폭이 작은것으로 하여 보임빛대역의 빛을 잘 흡수하는 우점이 있는 반면에 재결합확률이 크고 가전자띠와 전도띠의 에네르기준위가 물의 산화환원전위와 잘 맞지 않는 결함을 가지고있다. 물분해효률을 높이기 위하여 아산화티탄에 여러가지 혼입물을 첨가하는 방법들이 제기되고있는데 그중에서 질소혼입형아산화티탄을 제일 많이 리용하고있다. 그 리유는 질소원자와 산소원자의 크기가 비슷하고 이온화에네르기가 작으며 안정화시키는 역할을 하기때문이다.

우리는 n=4인 경우 즉 Ti_4O_7구조와 질소가 혼입된 $Ti_4O_5N_2$구조에 대하여 가전자띠로부터 전도띠에로의 전자이행과정에 대하여 미시론적으로 밝혔다.

론문에서는 Quantum Espresso(version 6.1)[3]를 리용하여 모든 계산을 진행하였다. 계산에서는 교환－상관밀도범함수로서 GGA의 PBE를 리용하였다. Ti의 3d궤도에 대한 U값을 5.44eV(0.4Ry)로 설정하였으며 스핀분극을 고려하지 않았다.

우선 에네르기띠구조계산을 진행하였다. 여기서 비점유궤도수를 20개로, k점경로를 G→F→Q→Z→G로 설정하였다.

그림 1에 Ti_4O_7결정과 $Ti_4O_5N_2$결정의 에네르기띠구조를 보여주었다.

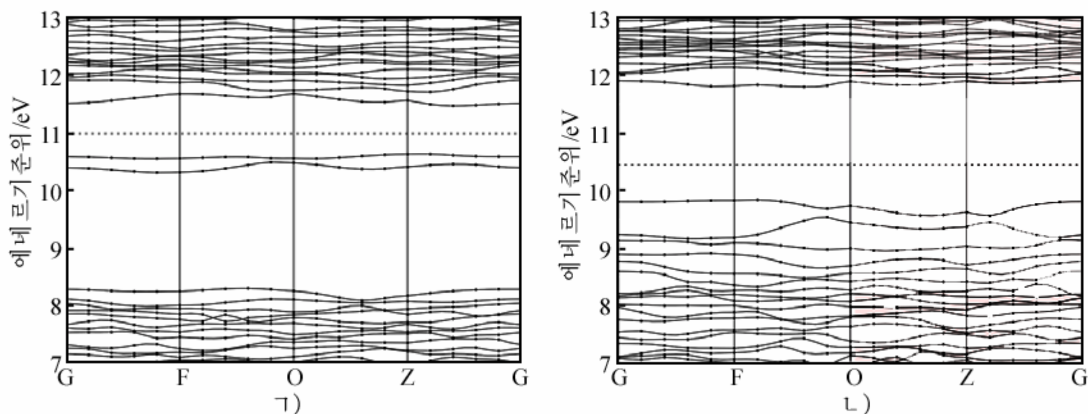


그림 1. 에네르기띠구조

ㄱ) Ti_4O_7결정, ㄴ) $Ti_4O_5N_2$결정

그림 1에서 보는바와 같이 Ti_4O_7결정에서는 금지띠폭이 0.839eV이며 $Ti_4O_5N_2$결정에서는 금지띠폭이 1.972eV이다. 이것은 TiO_2과는 달리 질소를 첨가하는 경우에 금지띠폭이 더 넓어진다는것을 의미한다.

이것을 밝히기 위하여 Ti_4O_7결정과 $Ti_4O_5N_2$결정의 부분상태밀도(PDOS)해석을 진행하였다.(그림 2)

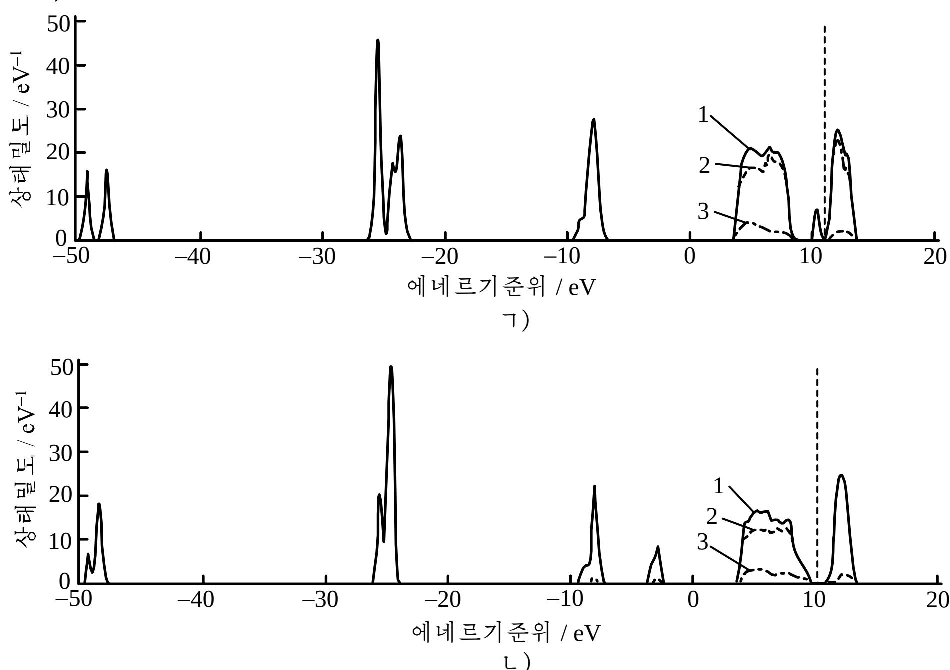


그림 2. 부분상태밀도(PDOS)

ㄱ) Ti_4O_7결정, ㄴ) $Ti_4O_5N_2$결정, 1－3은 각각 전체 상태밀도, *p*, *d*궤도에서의 상태밀도에 해당됨

그림 2에서 보는바와 같이 Ti_4O_7결정에서 페르미준위의 량쪽에서는 Ti의 3*d*궤도가 기본을 이루며 $Ti_4O_5N_2$결정에서 페르미준위의 왼쪽에서는 N의 2*p*궤도가, 오른쪽에서는 Ti의 3*d*궤도가 기본을 이룬다. 이것은 전자이행이 Ti_4O_7결정에서는 Ti의 3*d*궤도로부터 Ti의 3*d*궤도에로 일어나며 $Ti_4O_5N_2$결정에서는 N의 2*p*궤도로부터 Ti의 3*d*궤도에로 일어난다는것을 보여준다.

이것을 보다 구체적으로 리해하기 위하여 Ti_4O_7결정과 $Ti_4O_5N_2$결정에서 가전자띠와 전도띠의 전자분포를 보기로 하자.

그림 3에 Ti_4O_7결정에서 가전자띠와 전도띠에서의 전자분포를 보여주었다.

가전자띠에서의 전자분포는 Ti(I)형에, 전도띠에서의 전자분포는 Ti(II)형에 집중되여있으며 따라서 전자이행은 Ti(I)→Ti(II)에서 일어난다고 볼수 있다.

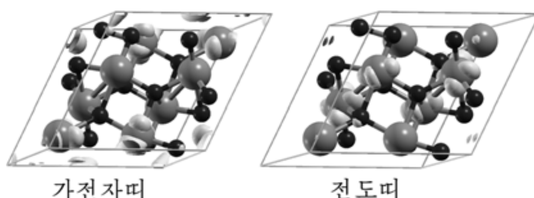


그림 3. Ti_4O_7결정에서 가전자띠와 전도띠에서의 전자분포

그림 4에 $Ti_4O_5N_2$결정에서 가전자띠와 전도띠에서의 전자분포를 보여주었다.

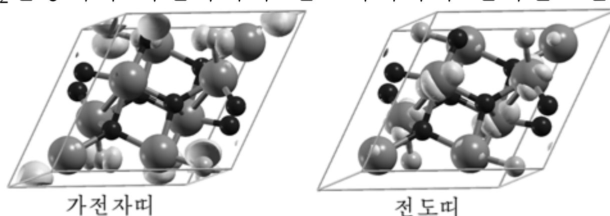


그림 4. $Ti_4O_5N_2$결정에서 가전자띠와 전도띠에서의 전자분포

전도띠에서의 전자분포는 Ti_4O_7에서와 같이 Ti(II)형에 집중되여있지만 가전자띠에서의 전자분포는 N원자들에 집중되여있다. 이것은 전자이행이 N→Ti(II)에서 일어난다는것을 의미한다.

맺 는 말

1) TiO_2에서와는 달리 Ti_4O_7에서는 질소를 첨가하면 금지띠폭이 넓어진다.
2) Ti_4O_7에서 전자이행은 Ti의 $3d$궤도로부터 Ti의 $3d$궤도에로 일어난다.
3) $Ti_4O_5N_2$에서 전자이행은 N의 $2p$궤도로부터 Ti의 $3d$궤도에로 일어난다.

참 고 문 헌

[1] K. Nakata et al.; Electrochim. Acta, 84, 103, 2012.
[2] S. S. Mao et al.; Nature Photonics, 7, 944, 2013.
[3] P. Giannozzi et al.; J. Phys: Condens. Matter, 21, 399502, 2009.

주체108(2019)년 6월 5일 원고접수

Ab Initio Study of the Electronic Structure of Ti_4O_7

Ri Mun Hyok, *Kim Kyong Il*

By using ab initio method, we obtained the band structure, PDOS(partial density of states) and the distribution of electrons in valence and conduction bands of Ti_4O_7 and $Ti_4O_5N_2$ structures, which shows that for Ti_4O_7, electronic transition occurs between 3d orbitals of Ti atoms, and for $Ti_4O_5N_2$, between 2p orbital of N atom and 3d orbital of Ti atom.

Key words: Ti_4O_7, ab initio, band gap

김일성종합대학학보 물리학
주체108(2019)년 제65권 제4호

레이자나무모처리에서 균일한 빛묶음보장의 한가지 방법

장영성, 최상진

경애하는 최고령도자 **김정은**동지께서는 다음과 같이 말씀하시였다.

《중앙과 지방들에서 양묘장들을 잘 꾸리고 나무모생산을 과학화, 공업화, 집약화하여 장군님께서 좋다고 평가하신 스트로브스소나무와 창성이깔나무를 비롯한 빨리 자라고 경제적리용가치가 큰 나무모들을 계단식으로 많이 생산보장하도록 하여야 합니다.》

현재 세계적으로 재배식물유전포텐샬의 보다 완전한 리용을 보장하는 기술수단과 방법, 그에 토대한 새롭고 효능이 높은 레이자농작물처리방법을 해결하기 위한 연구가 광범히 진행된 결과 간섭성전자기복사와 생물구조와의 호상작용과정이 깊이 연구되고 식물재배에서 레이자로 식물의 기능활성을 조종하는 방법이 보다 완성되였다. 나무모생산에서도 이 기술을 받아들이기 위한 연구[1, 3]가 적극 진행되고있다.

현재 개발한 레이자나무모처리장치는 나무모에 작용하는 여러가지 인자들(레이자파장, 빛세기, 쪼임시간 등)중에서 결정적역할을 하는것이 쪼임시간이라는것을 확증한데 기초하여 해당 수종에 맞게 레이자쪼임시간을 자유롭게 변화시킬수 있도록 설계제작되여있다.[2] 그러나 출력밀도가 균일하지 못한것으로 하여 위치에 따라 레이자빛이 나무모에 주는 작용효과에서 차이가 나타나고있으며 이로 하여 빛파라메터결정에도 부정적영향을 미치고있다.

론문에서는 레이자쪼임빛의 균일성을 개선하기 위한 한가지 방법을 제기하고 그에 기초하여 진행한 실험결과를 분석하였다.

1. 반도체레이자의 빛세기분포

반도체레이자의 빛세기는 가우스분포에 따른다. 그러나 현재 리용하고있는 반도체레이자들은 빛세기가 정확한 가우스분포를 이루지 못하고 대칭성이 약간 파괴되여있다. 이것을 고려하여 먼저 개별적인 반도체레이자의 빛세기분포를 측정하기 위한 실험장치를 구성하고 빛세기분포를 측정하였다.

빛세기분포측정장치구성은 그림 1과 같다.

장치설계에 따라 레이자의 높이를 25cm로 고정시켰을 때 1개 레이자의 쪼임면은 $4\text{cm}\times 10\text{cm}$의 크기를 가진다.

가로방향을 x축으로, 레이자에서 쪼임면에 수직으로 드리운 점을 자리표 0으로 보고 1mm간격으로 x자리표에 따르는 상대빛세기를 측정한 결과는 표와 같다.

$x-I$사이의 함수관계를 얻기 위하여 matlab도구를 리용하였다. 이때 다항식보간을 한 결과 7차다항식근사에서 다음의 식이 얻어진다.

$$I = a_1x^7 + a_2x^6 + a_3x^5 + a_4x^4 + a_5x^3 + a_6x^2 + a_7x + a_8$$

$a_1 = -1.974\cdot10^{-8}$, $a_2 = -6.074\,3\cdot10^{-7}$, $a_3 = 2.348\,8\cdot10^{-5}$, $a_4 = 0.000\,631\,23$, $a_5 = -0.009\,389\,9$, $a_6 = -0.236\,72$, $a_7 = 1.272\,4$, $a_8 = 32.448$

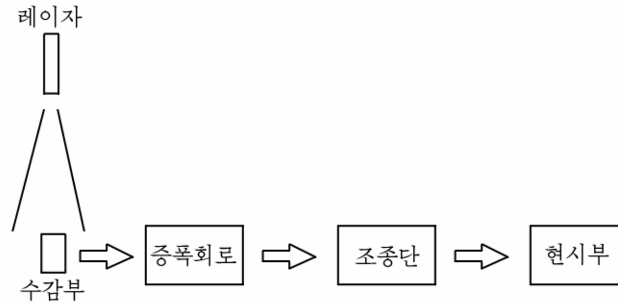


그림 1. 빛세기분포측정장치구성

표. x 자리표에 따르는 상대빛세기측정결과

x/mm	−20	−19	−18	−17	−16	−15	−14	−13	−12	−11	−10
I	0	0	1	1	2	2	4	4	6	6	10
x/mm	−9	−8	−7	−6	−5	−4	−3	−2	−1	0	1
I	12	13	16	18	20	24	28	30	32	33	34
x/mm	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
I	34	33	32	32	30	28	26	24	20	18	14
x/mm	13	14	15	16	17	18	19	20			
I	10	8	6	4	3	2	1	0			

x 축방향에 따르는 상대빛세기분포는 그림 2와 같다.

그림 2에서 보여주는바와 같이 얻어진 결과에 따르면 빛세기분포는 대칭정규분포에 따르지 않는다는것을 알수 있다.

2. 쪼임면겹침에 의한 균일빛묶음보장

그림 2에서 보는바와 같이 빛세기는 레이자의 중심부분에서 크고 변두리로 갈수록 작아진다.

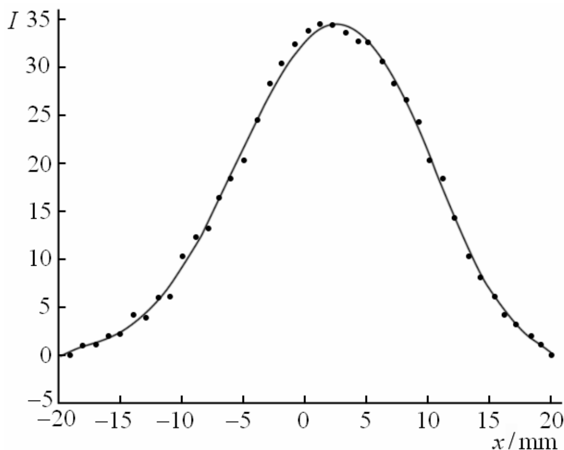


그림 2. x 축방향에 따르는 상대빛세기분포
• —측정값, 실선—보간곡선

빛세기분포곡선의 분산을 계산해보면 $\sigma = 57.228\,7$ 로서 대단히 크다는것을 알수 있다. 이로부터 두 레이자의 쪼임면을 겹치는 방법으로 빛세기의 균일성을 보장하기 위한 방법을 제기하고 그 효과성을 검증하였다.

이를 위하여 레이자사이의 거리를 1mm 간격으로 변화시키면서 두 레이자사이에 놓이는 구간에서 빛세기분포의 분산값을 계산하였다.

계산결과 $d = 23$mm 일 때 분산이 $\sigma =$

4.739로서 레이자사이구간의 빛세기변화가 제일 작아진다는 결론이 얻어진다.

$d = 23$mm 일 때 두 레이자사이의 빛세기분포는 그림 3과 같다.

그림 3에서 보는바와 같이 빛세기분포의 균일성이 높아졌다는것을 알수 있다.

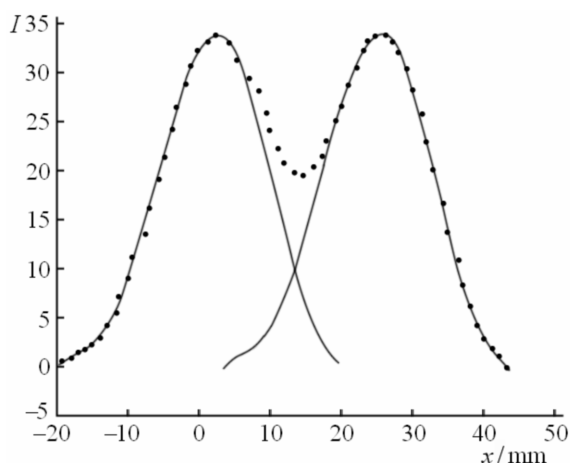


그림 3. 두 레이자사이의 빛세기분포
• —겹침빛묶음의 분포, 실선—개별적레이자의 분포곡선

맺 는 말

1) 두 레이자에서 나오는 빛을 겹치는 경우 일정한 정도의 균일빛묶음을 얻을수 있으며 $d = 23$mm 일 때 빛묶음의 균일도가 제일 높다.

2) 종전의 방법에 비하여 레이자의 개수가 거의 1.5배로 많아져 장치제작에서 원가가 많이 드는 부족점이 있지만 쪼임빛의 분산을 원래의 57.228 7로부터 4.739로 현저히 낮추었다.

참 고 문 헌

[1] **김일성**종합대학학보 물리학, 65, 3, 102, 주체108(2019).

[2] W. Jun Lin et al.; Acta Laser Biology Sinica, 15, 35, 2006.

[3] K. Hajim et al.; Lasers Med. Sci., 25, 5, 743, 2010.

주체108(2019)년 6월 5일 원고접수

On a Method of Keeping Light Beam Uniformly in Treating Seedlings by Using Laser

Jang Yong Song, Choe Sang Jin

We proposed a method to get properly identical light beams in the section between two lasers by overlaying light beams emitted from each laser and evidenced the effect. In the result we have decided that the distance of two lasers is 23 millimeters when the uniformity of light beams is highest.

Key words: laser, seedling, laser treatment

김일성종합대학학보 물리학
주체108(2019)년 제65권 제4호

반도체집적소자보호를 위한 양성자차페복합재료연구

박호남, 한금혁

우주비행체안에 내장되여있는 CPU를 비롯한 반도체집적소자들을 방사선으로부터 보호하는 문제는 실천적으로 매우 중요한 문제로 제기된다.

선행연구[1]에서는 우주기술발전분야에서 일어난 사고의 39%가 인공위성내부에 설치한 전자요소들이 우주복사환경에서 자체의 성능을 잃기때문이라고 평가하였다.

선행연구[2-4]에서는 우주비행체안에 내장되여있는 전자장치들을 보호할수 있는 중성자차페재료에 대하여 서술되여있다. 그러나 우주비행체들이 비행하는 반알렌띠에 존재하는 방사성립자들의 대부분이 수MeV로부터 300MeV까지의 에네르기를 가진 양성자들이다. 그러므로 이러한 양성자들의 흐름속에서 우주비행체가 비행하는 기간 반도체집적소자를 비롯한 전자요소들은 오동작하게 된다.

론문에서는 다층차페모의도구 MULASSIS를 리용하여 반도체집적소자를 보호할수 있는 양성자차페복합재료의 차페특성을 고찰하였다.

1. 양성자차페재료의 선정

양성자는 중성자와 질량수가 같으나 전하를 띤 립자로서 물질과 호상작용할 때 중성자와 물질과의 호상작용효과 이외에 물질원자안에서 전기마당과의 호상작용도 하게 된다. 즉 쪼임손상에 의하여 결함이 형성되거나 핵반응이 일어날수 있으며 물질을 이루는 전자들이 만드는 전기마당과의 호상작용도 일어난다.[1] 그 결과로 반도체집적회로는 오동작할수 있다.

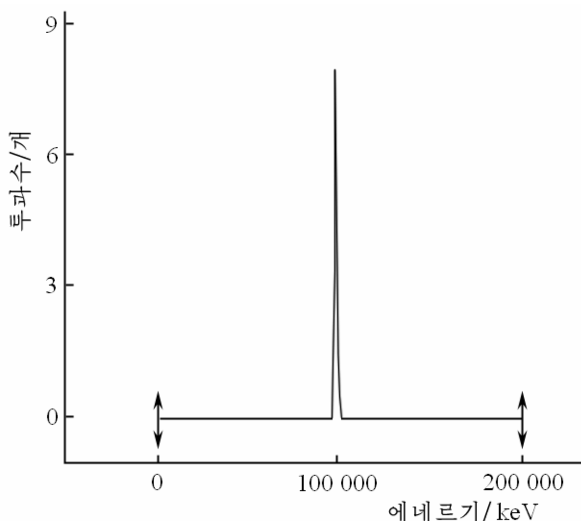


그림 1. 양성자투과스펙트르

양성자차페재료를 선정하기 위하여 원소주기표의 주요원소들에 대하여 모의를 진행하였다.

양성자원천은 반도체2극소자의 닫김시간이 변하는 최소흐름을 가상하여 인위적으로 조성하였다. 즉 전체 흐름속이 $10^{12}cm^{-2}$정도 되게 선정하였다.

양성자차페재료를 선정할 때 알루미니움보다 가벼우면서도 차페효과가 대등하도록 두께가 4.5mm인 에폭시수지우에 주기표의 주요원소들이 0.5mm두께로 부착된 차페구조를 가상하고 차페재료를 뚫고나온 전체 양성자수를 평가하였다.

Ni-0.5mm, 에폭시수지-4.5mm구조

의 양성자투과스펙트르는 그림 1과 같다.

우와 같은 방법으로 모의한 주요원소들의 양성자투과수는 표 1과 같다.

표 1에서 보는바와 같이 양성자차페에 좋은 재료들로서는 Co, Ni, Tl, Tc, Hg 등을 들수 있다. 이 재료들중에서 Ni을 기본재료로 선정하였다.

표 1. 주요원소들의 양성자투과수

원소명	투과수	원소명	투과수	원소명	투과수	원소명	투과수
Pb	15 360	W	15 393	B	20 036	Al	19 408
Si	20 943	C	19 962	Fe	15 571	Co	14 196
Ir	15 222	Ni	14 397	Pd	15 420	Sm	16 549
Gd	15 721	Tl	14 769	La	19 013	Ta	19 378
Ba	19 830	Ge	19 235	Rb	19 881	K	21 766
Ti	19 304	Kr	20 557	Ga	18 574	Br	20 667
Cr	15 911	Cu	15 248	Zn	19 535	Kr	20 557
Mn	15 730	Se	19 180	Mo	15 924	Y	19 535
Zr	15 541	Nb	15 282	Ag	15 240	Tc	14 929
Ru	15 668	Rh	15 582	Xe	19 525	Sb	16 754
Te	18 099	I	19 025	Os	15 113	Cs	18 239
Hf	15 692	Re	15 338	Bi	15 615	Pt	15 393
Au	17 239	Hg	14 971	Po	15 668	—	—

2. 양성자차페복합재료

일반적으로 고에네르기 방사성립자차페재료로서는 무거운 원소를, 저에네르기 방사선립자차페재료로서는 가벼운 원소로 된 재료를 리용한다.

우리는 무거운 원소로서 월프람과 니켈을 리용하였으며 가벼운 원소로서는 수소와 탄소를 포함하는 화합물을 주목하고 WC와 Ni, 흑연과 수소가 많이 포함되여있는 비스페놀*A*형수지를 선정하였다. 비스페놀*A*형수지는 150°C 정도의 온도에서도 탈기가 거의나 되지 않으므로 오랜 기간 써도 그 특성을 보존할수 있기때문에 적합한 재료로 인정되고있다. 실제적으로 탈기시험에서 이 재료는 합격된 재료로 판명되였다.

앞에서 지적한 4가지 재료의 배합비를 합리적으로 선정하기 위하여 $L_9(3^4)$직교표를 리용하였다.

인자와 수준은 표 2와 같다.

표 2. 인자와 수준

수준	인자			
	WC	Ni	흑연	에폭시
1	0.002 42	0.247 9	0.169 9	4.575 6
2	0.002 46	0.250 4	0.170 2	4.584 0
3	0.002 45	0.249 1	0.169 6	4.566 7

직교표에 기초하여 복합재료에 대한 양성자차폐률을 모의한 결과는 표 3과 같다.

표 3. 복합재료에 대한 양성자차폐률

시편번호	차폐률/%	시편번호	차폐률/%	시편번호	차폐률/%
1	99.990 847	4	99.99	7	99.991 15
2	99.990 913	5	99.989 43	8	99.991 45
3	99.990 53	6	99.989 9	9	99.991 18

표 3으로부터 알수 있는바와 같이 시편번호 8이 양성자를 가장 잘 차폐한다. 즉 WC−0.002 45mm, Ni−0.249 1mm, 흑연−0.170 2mm, 에폭시수지−4.566 7mm인 경우 양성자차폐가 99.991 45%로서 가장 잘 차폐되였다.

한편 반알렌띠에서의 양성자분포모의도구 OMERE를 리용하여 정지궤도위성의 초기자리길에 가까운 표본화된 궤도인 원지점고도 35 870km, 근지점고도 180km에서 모의한 양성자분포는 그림 2와 같다.

그림 2에서 보는바와 같이 양성자분포는 지수함수분포에 따른다. 이 곡선을 지수함수로 근사화하면 다음과 같다.

$$Y = 6.7 \cdot 10^7 \cdot \exp(-E/0.33) + 23\,087.9$$

여기서 E는 양성자의 에네르기이다.

시편 8에 대하여 원지점고도 35 870km, 근지점고도 180km인 경우의 양성자흐름속에서 모의한 양성자투과스펙트르는 그림 3과 같다.

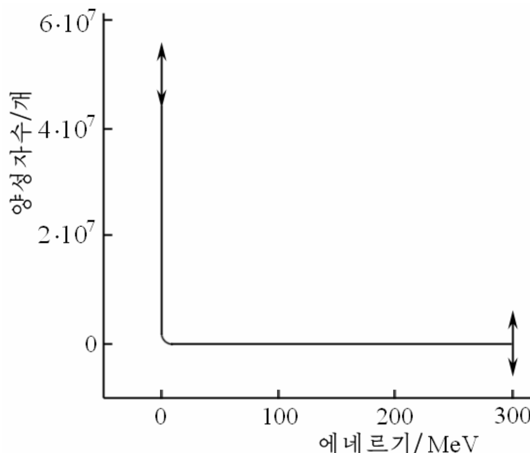


그림 2. 원지점고도 35 870km, 근지점고도 180km에서 모의한 양성자분포

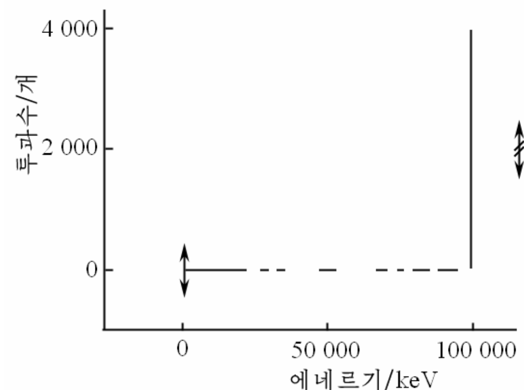


그림 3. 시편 8에 대한 양성자투과스펙트르

그림 3으로부터 양성자차폐복합재료는 100MeV근방의 양성자에 대해서만 얼마간의 투과를 허용하고 나머지대역에 대하여서는 거의나 차폐한다는것을 알수 있다.

이러한 양성자흐름에 대하여 복합재료의 양성자차폐률은 99.993 39%로서 같은 두께의 Al의 차폐률 99.993 29%와 류사하였다. 그러나 선정한 복합재료의 밀도는 1.6g/cm^{3}로서 Al(2.7g/cm^3)보다 훨씬 가벼우므로 우주비행체에서 양성자차폐에 효과적으로 리용할수 있다.

맺 는 말

모의결과는 새로운 복합재료가 전통적인 차폐재료인 Al에 비해볼 때 비중이 더 작고 차폐능력도 높은것으로 하여 우주비행체안의 전자요소보호에 리용할수 있다는것을 보여준다.

참 고 문 헌

[1] 고병춘, 재료의 방사선쪼임효과, 외국문도서출판사, 6～20, 주체105(2016).
[2] S. Chen et al.; Radiation Physics and Chemistry, 109, 27, 2015.
[3] S. Katz et al.; Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, B 333, 46, 2014.
[4] P. Vishwanath et al.; Journal of Non-Crystalline Solids, 404, 167, 2014.

주체108(2019)년 6월 5일 원고접수

Study on the Proton Shielding Complex Materials for the Protection of the Chips

Pak Ho Nam, Han Kum Hyok

The simulation results have shown that the novel complex materials can be used to the protection of electronic devices in space systems, because they have lower density and higher shielding capacity than Al which is traditional shielding material.

Key words: proton, shielding material

김일성종합대학학보 주체108(2019)년
물리학 제65권 제4호

적응형그물을 리용하여 류체흐름모의의 정확성을 높이기 위한 한가지 방법

김철홍, 최경혁

경애하는 최고령도자 **김정은**동지께서는 다음과 같이 말씀하시였다.

《자연과학부문에서는 식량문제, 에네르기문제를 비롯하여 인민경제발전과 국방력강화에서 절박하게 나서는 과학기술적문제들을 푸는데 적극 이바지하며 기초과학과 첨단과학기술부문에서 세계적인 경쟁력을 가진 연구성과들을 내놓아야 합니다.》

그물작성은 계산류체력학에서 매우 중요하다. 그것은 주어진 문제에 대하여 선택하는 그물형태에 따라 수값풀이를 얻을수도 있고 얻지 못할수도 있기때문이다. 이와 같은 리유로 하여 그물작성은 계산류체력학에서 중요한 하나의 체계를 구성한다.[1, 2]

론문에서는 대규모의 계산을 효과적으로 진행하기 위한 그물작성방법인 적응형그물작성법에 대하여 제기하였다.

계차법이나 유한요소법, 유한체적법과 같은 계산방법들은 리산그물점들에서 계산을 진행하여야 한다.

흐름마당에서 이러한 리산점들의 배렬을 그물이라고 하며 이와 같은 그물을 결정하는 방법을 그물작성(생성)이라고 한다.

수값계산의 정확도를 높이기 위해서는 흐름특성량들의 구배가 심한 구역에 보다 많은 그물점들을 조밀하게 밀집시켜야 한다. 그러나 이때 제기되는 문제는 그물점들을 조밀하게 배치할수록 계산량이 많아지게 된다는것이며 더우기는 흐름특성량들의 구배가 심한 구역을 모르는 경우에는 불가능하다는것이다. 이런 문제를 해결하기 위한 한가지 방법이 적응형그물을 리용하는것이다.

적응형그물은 흐름마당구배가 큰 구역에 그물점들을 자동적으로 밀집시키는 그물이다. 적응형그물의 우점은 고정된 그물점수에 대하여 정확도가 높다는것이다.

즉 적응형그물을 리용하면 같은 그물점수를 가지고 보다 정확한 모의결과를 얻을수 있다.[3]

여기서 적응이라는 의미는 풀이구역에 적응하여 구조그물이 아닌 비구조그물을 리용한다는 의미가 아니라 풀이의 정확성을 높이기 위하여 이미 작성한 그물을 개선한다는 의미를 담고있다.

일반적으로 적응처리는 2개의 구별되는 과제들로 구분되는데 하나는 개별적인 세포들을 표식하는것이고 다른 하나는 이 표식에 기초하여 계산세포들을 보다 세밀하게 하거나 거칠게 하는것이다.

세분화를 위하여 표식되는 세포들은 3각형은 4개의 3각형으로, 4각형은 4개의 4각형으로, 4면체는 8개의 4면체들로, 6면체는 8개의 6면체들로, 직3각기둥은 8개의 직3각기둥들로, 각추는 6개의 각추와 4개의 4면체들로 나눈다.(그림 1)

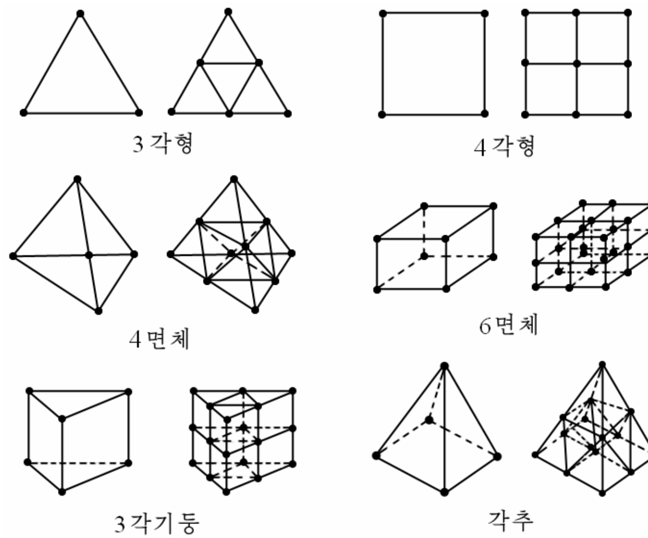


그림 1. 계산세포들의 세분화

적응처리에는 경계적응, 구배적응, 동적구배적응, 등값적응, 구역적응, 체적적응 등이 있다.

여기서는 정각이 15°인 쐐기형물체에 수평으로 들어오는 초음속류체흐름에 의한 경사충격파형성모의를 진행한 다음 구배적응형그물을 리용하여 모의의 정확도를 높이기 위한 방법을 고찰하였다.

모의대상의 기하학적형태는 그림 2와 같다.

그림 2에서 *ABCDEF*구간이 모의구간이며 *EF*는 쐐기형물체의 경계를 나타낸다. 이때 변 *AB*, *BC*, *CD*, *DE*들은 먼거리마당부분으로서 경계형태를 먼거리마당(far field)으로 규정하며 *EF*는 쐐기부분으로서 경계형태를 벽(wall)으로, *FA*는 대칭부분으로서 대칭(symmetry)으로 규정하였다. 먼거리마당경계값은 마흐수 3, 1기압, 온도는 300K으로 설정하였다.

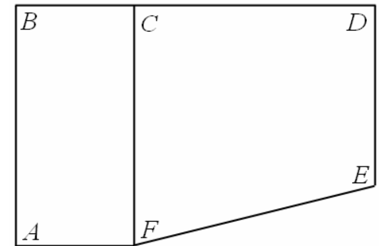


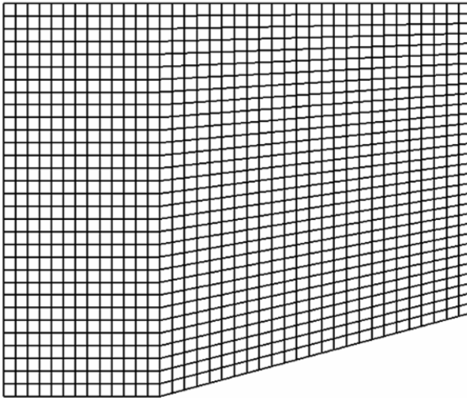
그림 2. 모의대상의 기하학적형태

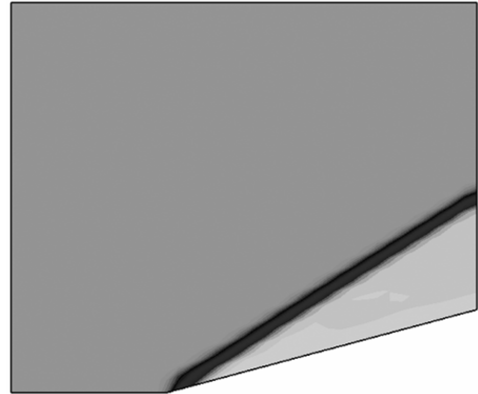
초기모의에 리용된 그물과 모의결과는 그림 3, 4와 같다.

그림 4에서 보면 쐐기우에서의 마흐수나 압력결수경계가 예리하지 않는데 이것은 모의정확도가 충분히 보장되지 못한 결과이다. 그래서 적응형그물을 리용하여 이 경계에서의 마흐수나 압력결수와 같은 물리적량들을 보다 정확히 모의하려고 한다.

구배를 취하려는 물리적량으로는 마흐수를 선택하였으며 턱값은 1차모의결과를 보면서 0.1로 결정하였다. 다음 필요한 세포들을 표식하고 적응하였다. 이때 얻어진 적응형그물은 그림 5와 같다.

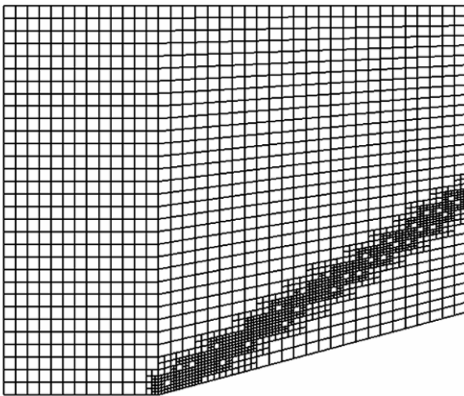
그림 5에서 보는것처럼 마흐수의 구배가 있는 부분의 세포들이 표식되고 분할되였다.

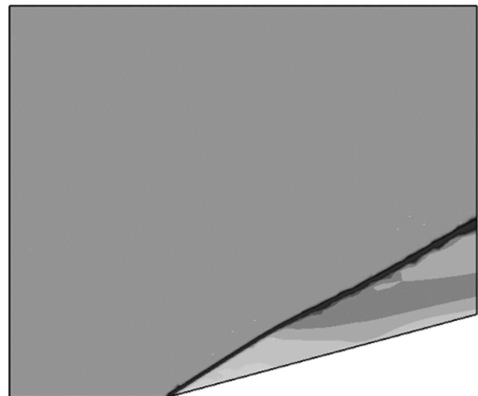

그림 3. 초기모의에 리용된 그물


그림 4. 초기모의결과(마흐수등고선)

이때 어느 정도로 분할하겠는가 하는것은 턱값에 따라 결정된다.

적응형그물을 리용한 모의결과는 그림 6과 같다.


그림 5. 적응형그물


그림 6. 적응형그물을 리용한 모의결과(마흐수등고선)

구배적응을 한 경우와 류사한 정확도의 풀이를 얻기 위해서는 처음보다 대략 10배정도 많은 그물을 리용하여야 한다. 이것은 기억기소비나 계산시간측면에서 불합리하다. 이 경우에 적응형그물을 리용하면 기억기소비나 계산시간을 줄이면서도 필요한 정확도를 보장할수 있다.

그물의 특성량은 표와 같다.

표. 그물의 특성량(개)

그물류형	세포수	면수	마디점수
초기그물	1 178	2 425	1 248
적응형그물	2 204	4 647	2 444
밴그물	21 450	44 027	22 578

맺 는 말

쐐기형물체주위의 초음속흐름모의에 대하여 적응형그물을 리용한 모의결과와 리용하지 않은 모의결과사이의 정량적인 대비분석을 통하여 적응형그물의 효과성을 검증하였다.

론문에서 리용한 방법은 대규모의 류체흐름모의를 비롯하여 주기억소비가 많은 계산들에 리용할수 있다.

참 고 문 헌

[1] 장대욱 등; 력학전서, **김일성**종합대학출판사, 293∼311, 주체102(2013).

[2] 장대욱; 계산류체력학과 응용, **김일성**종합대학출판사, 259∼276, 주체100(2011).

[3] K. pons et al.; Adaptive Mesh Refinement Method, hal-01330679, 2016.

주체108(2019)년 6월 5일 원고접수

Research of an Adaptive Meshing Method for Accuracy Improvement of Fluid Flow Simulation

Kim Chol Hong, Choe Kyong Hyok

We suggested an adaptive meshing method for accuracy improvement of large-scale simulation.

Key word: adaptive meshing method

진공섭동을 받는 고전립자의 스핀각운동량의 량자화현상

김일광, 김광일

무질서한 섭동매질속에서 브라운운동하는 고전립자는 공간적인 존재확률밀도가 불균일할 때 확산에 의하여 생기는 일종의 포텐샬 즉 확산포텐샬을 더 가지게 되며 이것을 하밀토니안에 반영하면 고전립자의 운동도 슈뢰딩게르파동방정식형태의 확률동력학적방정식을 만족한다.[1, 2] 선행연구[3, 8, 9]에서는 시공간이 프락탈성을 가진다고 가정하고 프락탈시공간속에서 운동하는 고전립자의 운동방정식이 량자력학적 또는 량자마당론적방정식형태를 가진다는데 대하여 수학적으로 고찰하였다.

일반적으로 립자는 진공요동이나 열요동과 같은 매질의 무질서한 섭동작용에 의하여 회전축방향과 회전각이 무질서하게 변하는 회전브라운운동을 하게 된다. 회전브라운운동에 의한 회전확산은 유전완화(dielectric relaxation), 형광편극소실(fluorescence depolarization)과 같은 편극된 량들의 완화가 일어나는 현상들에 대한 연구에서 중요하게 제기되였다. 아인슈타인(Einstein, 1906)은 열요동매질속에 있는 구형립자의 1차원회전확산에 대하여 고찰하였고 데바이(Debye, 1929)는 스몰루홉스끼(Smoluchowski)방정식에 기초하여 외부마당의 영향을 고려한 회전확산리론을 처음으로 제기하였다.[4] 그리고 코페이(Coffey, 1996)는 회전확산에 대한 보다 발전된 리론을 제기하였으며 깔미꼬브(Kalmykov)는 구체적인 경우들에 대한 연구를 진행하였다.[5, 7, 10]

우리는 립자의 병진브라운운동에서 나타나는 량자화현상이 가장 단순한 자체회전운동의 경우로서 고정축주위로 회전할수 있는 고전립자의 자기축회전브라운운동에서도 나타난다는것을 보여주었다. 즉 섭동매질속에 어떤 고정축(실례로 Z축)주위로 회전할수 있는 고전립자가 만족하는 회전운동에 대한 확률동력학적방정식을 유도하였다. 물론 회전축이 고정되지 않은 회전운동에 대한 보다 일반적인 방정식을 유도하는것도 원리적으로 가능하지만 립자의 확률적회전량자화의 본질을 파악하는데서는 가장 간단한 경우에 대하여 먼저 연구하는것이 편리하다.

1. 진공섭동매질속에서 회전브라운립자의 브라운회전확산포텐샬

먼저 공간에 설정한 관성자리표계 $\{X, Y, Z\}$의 Z축과 립자에 고정한 자리표계 $\{X', Y', Z'\}$의 Z'축을 일치시키고 X와 X'축사이의 각 또는 Y와 Y'축사이의 각을 문자 φ로 표시하자. 그리고 립자의 관성모멘트를 I로 표시하고 그것의 회전운동에 영향을 주는 어떤 외부마당의 포텐샬을 $U_e(\varphi, t)$라고 하자.

립자는 진공매질로부터 받는 섭동에 의하여 회전요동운동을 한다. 즉 립자에 작용하는 외부회전모멘트는 항상 우연적인 어떤 요동성분을 가지게 된다. 다시말하여 립자는 외부마당의 포텐샬 $U_e(\varphi, t)$에 의한 뉴톤력학적회전운동과 함께 회전브라운운동도 동반하며 실제적인 립자의 회전각 $\varphi(t)$는 평균회전각 $\overline{\varphi}(t)$근방에서 우연요동하면서 변화된다.

우연요동회전성분이 있으므로 립자의 회전운동은 확률과정으로 되며 불가피하게 확률분포함수 $f(\varphi, t)$를 받아들이게 된다.

회전운동만 하는 경우 분포함수 $f(\varphi, t)$는 립자의 X'축과 관성자리표계의 X축(혹은 Y'축과 관성자리표계의 Y축)사이의 각 φ가 그 근방의 단위각구역안에 있을 확률 즉 립자에 고정된 X'축이 각 φ근방에 나타날 확률밀도를 의미하는데 다음과 같은 규격화조건을 만족시켜야 한다.

$$\int_0^{2\pi} f(\varphi,\ t)d\varphi = 1 \tag{1}$$

또한 병진브라운운동에서와 마찬가지로 1차원회전브라운운동을 하는 립자는 확률밀도가 큰 각위치로부터 확률밀도가 작은 각위치로 점차 회전확산하게 된다.[6]

한편 확률회전흐름의 련속성을 표시하는 스몰루홉스끼방정식은 다음과 같이 표시된다.

$$\frac{\partial f}{\partial t} = \nabla(\boldsymbol{j}_d + \boldsymbol{j}_e) \tag{2}$$

여기서 ∇는 1차원각자리표계 즉 각공간 $\{\varphi\}$에서 표시한 구배연산자이고 $\boldsymbol{j}_d$는 회전확산에 의한 회전흐름확률밀도벡토르, $\boldsymbol{j}_e$는 외부마당으로부터 받는 회전모멘트에 의한 회전흐름확률밀도벡토르이다.

회전확산에 의한 회전흐름확률밀도벡토르는 다음과 같이 표시된다.

$$\boldsymbol{j}_d = -D_r \nabla f(\varphi,\ t) \tag{3}$$

여기서 D_r는 회전확산결수이다. 식 (3)은 병진브라운립자의 확산에 대한 피크(Fick)의 법칙을 회전확산의 경우에 대하여 그대로 적용한것이다. 회전흐름확률밀도벡토르 $\boldsymbol{j}$의 물리적의미는 립자에 고정한 X'축 혹은 Y'축이 어떤 각위치 φ근방의 단위각구역안에서 회전각속도 ω로 회전할 확률밀도이다.

우리는 1차원회전운동에 대하여 론의하므로 이 경우에 식 (3)은 다음과 같이 간단하게 된다.

$$\boldsymbol{j}_d = -D_r \frac{\partial f(\varphi,\ t)}{\partial \varphi} \tag{4}$$

식 (4)의 물리적의미는 고정축주위로의 회전브라운운동에서는 임의의 t시각에 확률밀도 $f(\varphi, t)$가 큰 각위치 φ로부터 확률밀도가 작은 각위치 $\varphi + \Delta\varphi$로 회전확산에 의하여 확률적인 표류회전흐름이 생긴다는것이다. 다시말하여 어떤 회전각표류속도 ω_d가 생긴다. 그러면 식 (4)를 $\boldsymbol{j}_d = f(\varphi,\ t)\omega_d$와 같이 적을수 있다.

병진브라운운동에서와 마찬가지로 각위치 φ에 따르는 확률밀도불균일에 의하여 생기는 회전운동에네르기는 다음과 같다.[1]

$$\frac{I\omega_d^2}{2} = \frac{ID_r^2}{2}\left(\frac{1}{f(\varphi,\ t)}\frac{\partial f(\varphi,\ t)}{\partial \varphi}\right)^2 \tag{5}$$

식 (5)는 립자가 각위치 φ인 상태에 있을 때 회전운동에네르기 $\frac{I\omega_d^2}{2}$으로 넘어갈수 있는 보충적인 에네르기이며 어떤 순간 t에 각위치 φ에만 관계되는 량이므로 브라운회전확산포텐샬이라고 부르고 $U_d(\varphi,\ t)$로 표시하겠다.

2. 섭동매질속에서 브라운회전확산포텐샬을 고려한 고정축주위로의 립자의 회전운동에 대한 확률동력학적방정식

먼저 회전확산포텐샬을 고려하여 고정축주위로 회전하는 립자의 하밀톤함수밀도를 작성하면 다음과 같다.

$$\mathcal{H}(\varphi,\ t)=f(\varphi,\ t)\left[\frac{1}{2I}\left(\frac{\partial}{\partial\varphi}S(\varphi,\ t)\right)^2+U_e(\varphi,\ t)+U_d(\varphi,\ t)\right] \tag{6}$$

여기서 $U_e(\varphi,\ t)$는 회전운동을 야기시키는 외부마당의 포텐샬이고 $S(\varphi,\ t)$는 일반적으로 립자의 각자리표 φ와 시각 t에 관계되는 작용량이다. 우리의 경우에는 립자의 병진운동의 운동량에 대한 공식에 대응하게 회전운동의 평균각운동량을 작용 $S(\varphi,\ t)$를 리용하여 다음과 같이 표시할수 있다.

$$I\omega(\varphi,\ t)=\frac{\partial}{\partial\varphi}S(\varphi,\ t) \tag{7}$$

그리고 $U_d(\varphi,\ t)$는 립자의 회전확산포텐샬이다. 식 (6)을 구체적으로 다음과 같이 표시할수 있다.

$$\mathcal{H}(\varphi,\ t)=f(\varphi,\ t)\left[\frac{1}{2I}\left(\frac{\partial}{\partial\varphi}S(\varphi,\ t)\right)^2+U_e(\varphi,\ t)+\frac{ID_r^2}{2}\left(\frac{1}{f(\varphi,\ t)}\frac{\partial f(\varphi,\ t)}{\partial\varphi}\right)^2\right] \tag{8}$$

이 하밀토니안은 립자의 평균각운동량을 결정하는 량인 $S(\varphi,\ t)$와 립자가 각 φ의 회전상태에 나타날수 있는 확률밀도 $f(\varphi,\ t)$로 표시되여있다.

량 S와 f를 립자의 확률력학적상태를 규정하는 정준변수로 선정하고 하밀톤형식론에서 잘 알려진 정준방정식

$$\frac{\partial f}{\partial t}=\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial S}-\frac{\partial}{\partial\varphi}\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\left(\frac{\partial S}{\partial\varphi}\right)} \tag{9}$$

$$-\frac{\partial S}{\partial t}=\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial f}-\frac{\partial}{\partial\varphi}\frac{\partial\mathcal{H}}{\partial\left(\frac{\partial f}{\partial\varphi}\right)} \tag{10}$$

에 대입하면 하밀톤—야꼬비방정식과 회전운동에 대한 다음의 확률련속방정식을 얻는다.

$$-\frac{\partial S}{\partial t}=\frac{1}{2I}\left(\frac{\partial S}{\partial\varphi}\right)^2+U_e(\varphi,\ t)+\frac{ID_r^2}{2}\left[\left(\frac{1}{f}\frac{\partial f}{\partial\varphi}\right)^2-\frac{2}{f}\frac{\partial^2 f}{\partial\varphi^2}\right] \tag{11}$$

$$-\frac{\partial f}{\partial t}=\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\frac{f}{I}\frac{\partial S}{\partial\varphi}\right) \tag{12}$$

이제

$$f=f_0e^{-2Q} \tag{13}$$

을 표시하는 새로운 량 Q를 받아들이고 방정식 (11), (12)를 Q에 대한 방정식으로 변환한 다음 다시 또 다른 변수변환

$$P = \frac{S}{d_r} + iQ \tag{14}$$

에 의하여 두 방정식을 새로운 복소수량 P 에 대한 1개의 방정식으로 넘긴다.[1, 2] 여기서 Q 는 무본량, f_0 은 f 와 물리적본이 같은 임의의 상수, d_r 도 역시 량 S 와 물리적본이 같은 량으로서 임의로 선택할수 있는 상수량, $i = \sqrt{-1}$ 이다. 1∶1넘기기들인 넘기기 식 (13)과 (14)에 의하여 얻어지는 복소수량 P에 대한 방정식은 비선형편미분방정식으로 된다. 이제

$$d_r = 2ID_r \tag{15}$$

로 하면 P에 대한 방정식은 훨씬 간단해진다.[1]

변수변환

$$P = -i\ln\frac{\psi}{\sqrt{f_0}}, \qquad \psi = \sqrt{f_0}\,e^{iP} = \sqrt{f}\,e^{i\frac{S}{d_r}} \tag{16}$$

을 하여 새로운 복소수함수 ψ 에 대한 방정식으로 넘기면 다음과 같다.

$$id_r\frac{\partial\psi}{\partial t} = -\frac{d_r^2}{2I}\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + U_e(\varphi,\ t)\psi \tag{17}$$

식 (15)를 고려하면 식 (17)은 다음과 같이 표시된다.

$$i2ID_r\frac{\partial\psi}{\partial t} = -2ID_r^2\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} + U_e(\varphi,\ t)\psi \tag{18}$$

우의 변환들을 리용하여 계산하면 $f(\varphi,\ t) = \psi(\varphi,\ t)^*\psi(\varphi,\ t)$ 는 립자에 고정한 X' 축과 관성자리표계의 X축사이의 각이 t시각에 φ 인 상태에 있을 확률밀도 $f(\varphi,\ t)$ 이며

$$\boldsymbol{j} = \frac{id_r}{2I}\left(\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial\varphi} - \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\right) = iD_r\left(\psi\frac{\partial\psi^*}{\partial\varphi} - \psi^*\frac{\partial\psi}{\partial\varphi}\right) \tag{19}$$

는 각공간에서 확률흐름밀도의 물리적의미를 가진다는것을 알수 있다. 또한

$$\boldsymbol{\omega} = \boldsymbol{j}/\psi^*\psi = \frac{id_r}{2I}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\ln\frac{\psi^*}{\psi}\right) = iD_r\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\ln\frac{\psi^*}{\psi}\right) \tag{20}$$

는 립자의 위치가 각 φ 일 때 립자의 평균회전각속도의 의미를 가지며

$$L = I\omega = I\cdot j/\psi^*\psi = \frac{id_r}{2}\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\ln\frac{\psi^*}{\psi}\right) = iID_r\frac{\partial}{\partial\varphi}\left(\ln\frac{\psi^*}{\psi}\right) \tag{21}$$

는 각운동량의 물리적의미를 가진다는것을 알수 있다.

3. 외부힘마당이 $U_e(\varphi,\ t) = 0$ 일 때 진공섭동을 받는 고전립자의 확률동력학적회전운동방정식에 대한 간단한 풀이와 해석

진공섭동매질속에서 고정축주위로 회전할수 있는 립자가 그 어떤 외부힘마당의 영향도 받지 않는 경우 그 립자의 회전운동에 대한 확률동력학적방정식 (17) 혹은 (18)의 간단한 풀이를 구해보자.

이 경우에 방정식 (17) 혹은 (18)을 다음과 같이 적을수 있다.

$$i\frac{\partial\psi}{\partial t} \cong -D_r\frac{\partial^2\psi}{\partial\varphi^2} \tag{22}$$

풀이형태를 $\partial\psi = T(t)\cdot\Phi(\varphi)$와 같이 놓고 변수분리상수 ε을 받아들이면 방정식 (22)는 다음과 같다.

$$i\frac{\partial T}{\partial t} - \varepsilon T = 0 \tag{23}$$

$$\frac{\partial^2\Phi}{\partial\varphi^2} + \frac{\varepsilon}{D_r}\Phi = 0 \tag{24}$$

방정식 (23)과 (24)의 일반풀이는 다음과 같다.

$$\psi(\varphi,\ t) = e^{-i\varepsilon t}(C_1e^{i\xi\varphi} + C_2e^{-i\xi\varphi}) \tag{25}$$

여기서 상수 C_1과 C_2는 각각 경계조건과 규격화조건에 의하여 구해지는 상수, ξ는

$$\xi = \sqrt{\frac{\varepsilon}{D_r}}\,. \tag{26}$$

한편 고정축주위로의 회전운동에 대한 경계조건

$$\psi(\varphi,\ t) = \psi(\varphi + n2\pi,\ t) \quad (n = 0, \pm1,\ \pm2,\ \cdots) \tag{27}$$

을 만족하기 위하여서는 일반풀이 (25)에서 ξ가 $\xi = n$을 만족시키는 옹근수이여야 한다는것을 알수 있다. 또한 식 (26)은 다음과 같이 표시된다.

$$\varepsilon = D_r n^2 \tag{28}$$

결과 고전립자의 고정축주위로의 회전운동상태(스핀상태)는 확률동력학적방정식 (17)의 고유함수 $\psi_n(\varphi,\ t)$로 표시되는 량자화된 고유상태

$$\psi_n(\varphi,\ t) = \frac{1}{\sqrt{2\pi}}e^{-i(D_r n^2 t - n\varphi)} \quad (n = 0,\ \pm1,\ \pm2,\ \cdots) \tag{29}$$

에 있거나 이 고유상태들의 중첩상태에 있을수 있다.

이제 고유상태들에 대한 풀이 (29)와 각운동량에 대한 식 (21)을 리용하여 회전고유상태들의 각운동량을 계산하면 다음과 같은 식들을 얻는다.

$$L_n = nd_r \quad (n = 0,\ \pm1,\ \pm2,\ \cdots) \tag{30}$$

또는

$$L_n = 2nID_r \quad (n = 0,\ \pm1,\ \pm2,\ \cdots)\,. \tag{31}$$

이와 같이 섭동매질속에서 브라운운동을 하는 고전립자의 고정축(Z축)주위로의 스핀각운동량의 값들은 $d_r = 2ID_r$의 옹근수배로 량자화된다.

한가지 실례로 질량이 구면우에만 집중되여있는 구각형태의 립자의 스핀각운동량을 평가해보자.

량자화된 각운동량들의 구체적인 값들을 계산하기 위해서는 먼저 구체적인 경우에 해당한 d_r의 값을 구해야 한다. 그러자면 해당한 립자의 관성모멘트 I와 회전확산결수 D_r를 알아야 한다. 우리의 경우에는 반경이 a이고 질량이 m인 구각형태의 립자에 대하여 d_r를 계산하여야 한다. 이를 위하여 먼저 점성결수가 η인 매질속에서 구형립자의 병진브라운운동의 확산결수 D_t와 회전브라운운동의 확산결수 D_r가 각각 다음과 같은 식들로 표시된다는것을 상기하자.[7]

$$D_t = \frac{k_B T}{6\pi\beta a}, \quad D_r = \frac{k_B T}{8\pi\beta a^3} \tag{32}$$

여기서 k_B는 볼츠만상수, T는 열요동매질의 온도이다.

식 (32)로부터 다음과 같은 관계식을 얻을수 있다.

$$\frac{D_r}{D_t} = \frac{3}{4a^2} \tag{33}$$

식 (33)에서 보는것처럼 두 확산결수의 비는 그것이 주위매질의 온도, 점성결수와 같은 섭동매질의 구체적인 특성에는 관계없고 구형립자의 반경에만 관계된다. 그러므로 우리는 이 관계식이 진공섭동매질속에서도 그대로 성립한다고 가정하겠다.

구각형태의 립자에 대하여 식 (15)와 (33)을 리용하면 $d_r = 2ID_r = I(3/2)(D_t/a^2)$ 이라고 쓸수 있고 이 식에 구각의 관성모멘트 $I = 2ma^2/3$을 대입하면 식

$$d_r = mD_t = d_t/2 \tag{34}$$

를 얻는다. 여기서 병진브라운운동의 확률동력학적방정식을 론의할 때 나타나는 관계식 $d_t = 2mD_t$를 리용하였다.

그러면 진공속에서 병진브라운립자에 대한 관계 $d_t = \hbar$와 식 (34)로부터 진공속에서 Z축주위로 자체회전하는 구각형태의 고전립자의 각운동량에 대한 식 (30)은 다음과 같이 표시된다.

$$L_n = n\hbar/2 \quad (n = 0, \pm 1, \pm 2, \cdots) \tag{35}$$

식 (35)로부터 진공매질속에 있는 구각형태의 고전립자의 량자화된 각운동량들의 크기가 립자의 질량과 크기에 무관계하다는것을 알수 있다. 물론 이 결과는 특수한 경우에 해당한것이다.

맺 는 말

진공섭동매질속에서 어떤 고정축주위로 자체회전할수 있는 고전립자의 1차원적인 회전운동에 대한 확률동력학적방정식을 세우고 그것에 기초하여 립자의 고유각운동량이 량자화된다는것을 밝혔다. 그리고 구체적인 실례로 진공섭동매질속에 있는 구각형태의 고전립자의 고유각운동량의 Z성분이 식 (35)와 같이 량자화되며 구각형립자의 질량과 크기에는 무관계하다는것을 밝혔다. 만일 공기를 배기한 진공속에서 즉 끈기가 없는 매질속에서 구형 또는 구각형나노립자들의 자체회전(스핀)에네르기준위들의 려기현상을 보여주는 실험을 진행할수 있다면 론문에서 제기된 섭동매질속에서 고전립자의 스핀량자화에 대하여 확인할수 있을것이다. 이 현상이 실험적으로 확인되면 기초리론발전뿐아니라 량자콤퓨터기술 등 응용기술발전에서도 새로운 전진을 이룩할수 있는 계기로 될것이라고 생각한다.

참 고 문 헌

[1] **김일성**종합대학학보 물리학, 64, 4, 37, 주체107(2018).

[2] **김일성**종합대학학보 물리학, 65, 1, 28, 주체108(2019).

[3] G. N. Ord; International Journal of Theoritical Physics, 35, 2, 263, 1996.

[4] A. Einstein et al.; Ann. Phys. 19, 371, 1906.
[5] W. T. Coffey et al.; The Langevin Equation with Application in Physics, Chemistry and Electrical Engineering, World Scientific, 38～60, 2004.
[6] R. M. Mazo; Brownian Motion (Fluctuations, Dynamics, Application), Oxford University Press, 74～92, 2002.
[7] Yu. P. Kalmykov et al.; Journal of Molecular Structure, 479, 123, 1999.
[8] G. N. Ord; Chaos, Soliton, Fractals, 17, 609, 2003.
[9] M. Celerier et al.; arXiv:1009, 2934u1[Physics. gen-ph] 2010.
[10] W. T. Coffey et al.; Advances in Chemical Physics, 133, 284, 2006.

주체108(2019)년 6월 5일 원고접수

The Quantization of Spin Angular Momentum of Classical Particle Undergoing the Vacuum Perturbation

Kim Il Gwang, Kim Kwang Il

We proposed a postulate that vacuum is a kind of perturbation medium which causes random fluctuation to the spin-rotational motion of the particle as ordinary thermodynamic medium. Then on the basis of this postulate, we constructed the stochastic dynamical equation on one dimensional spin motion of classical particle in vacuum medium, and showed that spin angular momentum of a classical particle was quantized. Also, to illustrate a simple example we showed that *Z*-component of spin angular momentum of a classical particle with spherical surface shape in vacuum was quantized as follows

$$L_n = n\hbar/2 \quad (n = 0,\ \pm 1,\ \pm 2,\ \cdots).$$

Key word: spin angular moment

김일성종합대학학보 주체108(2019)년
물리학 제65권 제4호

립방질화붕소소결체에서 결합제의 체적비에 대한 연구

리영섭, 리창남

립방질화붕소(cBN)소결체제조에서는 cBN분말의 립도에 따라서 결합제의 체적비가 정해진다. cBN의 립도가 1∼2μm인 경우[1, 2]에는 결합제의 체적을 40∼50%로 선택하며 5∼10μm인 경우[4]에는 10∼15%로 선택한다.

이와 같이 cBN분말립도에 따라 결합제의 체적비를 선택하는것이 합리적이라는데 대해서는 실험적으로 고찰되였지만 그 원인에 대해서는 구체적으로 밝혀진것이 없다.

론문에서는 립방질화붕소소결체에서 결합제체적비의 립도의존성을 고찰하였다.

cBN소결체의 파괴는 소결체속에 반드시 포함되여있는 균렬끝에서 발생하는 응력집중에 의하여 일어나며 소결체의 파괴를 일으키는 균렬전파가 가능한 곳은 cBN결정알갱이와 결합제사이의 경계구역이다.[3]

주어진 파괴인성을 가진 cBN소결체의 cBN알갱이크기를 D_0, cBN상의 체적비를 k_v^0 (결합제의 체적비는 $1-k_v^0$), 립방체형소결체의 한변의 길이를 a라고 하자.

동일한 파괴인성을 가지면서 cBN알갱이의 크기가 D인 소결체의 cBN상의 체적비 k_v를 다음과 같이 구하였다.

cBN알갱이의 개수는 다음과 같다.

$$n=\frac{6a^3k_v}{\pi D^3} \tag{1}$$

cBN소결체에 있는 cBN알갱이들의 전체 면적은 다음과 같다.

$$S=n\cdot\pi D^2 \tag{2}$$

결합제의 단위체적에 해당한 상계면적밀도는 다음과 같다.

$$\frac{S}{a^3(1-k_v)}=\frac{6k_v}{D(1-k_v)} \tag{3}$$

cBN알갱이크기가 다르지만 파괴인성이 같은 소결체들사이에 다음의 식이 성립한다.

$$\frac{6k_v^0}{D_0(1-k_v^0)}=\frac{6k_v}{D(1-k_v)} \tag{4}$$

따라서 cBN알갱이의 크기에 따르는 체적비의 의존성에 대한 다음과 같은 식을 얻을수 있다.

$$k_v=\frac{k_v^0D}{D_0+(D-D_0)\cdot k_v^0} \tag{5}$$

식 (5)로부터 주어진 인성값을 가지는 cBN소결체에서 cBN알갱이의 크기에 따르는 cBN상의 체적비는 그림 1과 같다.

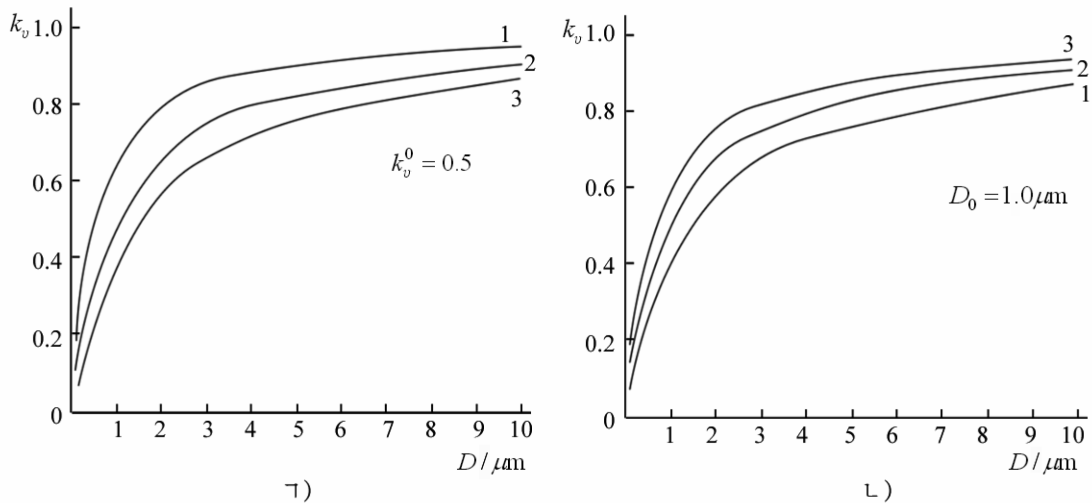


그림 1. 주어진 인성값을 가지는 cBN소결체에서 cBN알갱이의 크기에 따르는 cBN상의 체적비
ㄱ) k_v^0이 일정한 경우(1－3은 D_0이 각각 0.5, 1.0, 1.5μm), ㄴ) D_0이 일정한 경우(1－3은 k_v^0이 각각 0.4, 0.5, 0.6)

그림 1로부터 식 (5)가 cBN소결체제조에서 cBN분말의 크기가 1～2μm정도일 때 cBN상의 체적비는 50～60%이며 cBN알갱이의 크기가 5～10μm정도일 때 cBN상의 체적비는 80～90%범위에서 변한다는 실험적사실[1, 2]을 만족시킨다는것을 알수 있다.

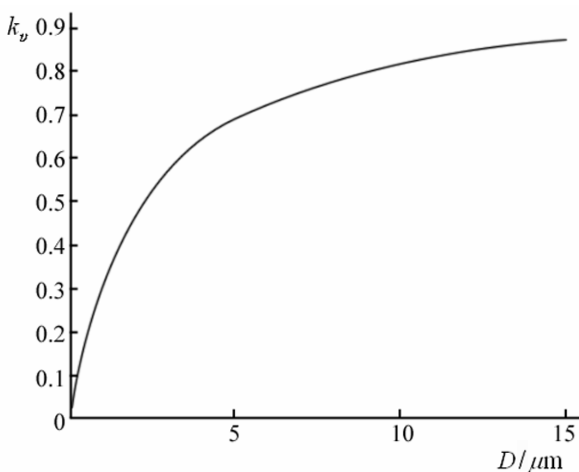
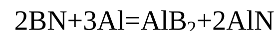


그림 2. 각이한 립도에 따르는 체적비

파괴인성값이 7.5MPa$\cdot$m$^{1/2}$인 cBN-Al소결체[1](D_0=9.8μm, $k_v^0 = 0.812$)와 꼭같은 특성을 가진 소결체를 얻기 위하여 각이한 립도에 따르는 체적비를 고찰하였다.(그림 2)

그림 2에서 보는바와 같이 cBN상의 크기가 5μm인 소결체를 합성하려고 하는 경우에 cBN상의 체적비는 0.69이다.

반응식



$$2BN+3Al=AlB_2+2AlN$$

으로부터 AlB_2+2AlN조성의 결합제가 40.38cm^3 생기자면 cBN이 14.26cm^3, Al이 33.31cm^3 소비되여야 한다. 소결체의 cBN상의 체적비가 0.691 2로 되자면 결합제의 체적이 40.38cm^{3}일 때 cBN상의 체적은 90.21cm^{3}로 되여야 한다.

반응과정에 소비되는 cBN을 고려하면 반응소결을 위한 반응물의 체적비는 cBN : Al=104.47 : 33.31=76 : 24로 되여야 한다.

cBN의 립도가 크면 cBN알갱이들사이를 차지한 Al의 체적이 커지기때문에 소결시간이 길어진다. 소결시간을 작게 하자면 BN알갱이들사이를 차지한 Al의 체적이 작아야 한다.

Al의 체적을 작게 하기 위하여 즉 결합제 형성시간을 작게 하기 위하여 보다 크기가 훨씬 작은 wBN을 함께 사용하여 반응면적을 크게 하였다. 그리하여 cBN-Al소결체의 출발조성을 표와 같이 선택하고 소결을 진행하였다.

얻어진 cBN소결체의 파괴인성값 $7.6 \pm 0.2(\mathrm{MPa \cdot m^{1/2}})$ 은 결합제의 체적비에 대한 견해가 실험과 잘 일치한다는것을 보여준다.

표. cBN-Al소결체의 출발조성

	분말립도/μm	체적비/%	질량비/%
cBN	5	70	74
wBN	0.5	6	6
Al	2	24	20

맺 는 말

cBN소결체의 파괴인성이 상계면적밀도에 비례한다는 사실에 기초하여 기하학적인 미시구조지수들을 리용하여 결합제의 체적비를 선택하는 방법을 밝혔다.

참 고 문 헌

[1] 리영섭 등; 금속, 1, 11, 주체101(2012).

[2] T. K. Harris et al.; International Journal of Refractory Metals & Hard Materials, 22, 105, 2004.

[3] P. F. Wang et al.; Solid State Sciences, 13, 1041, 2011.

[4] L. Li et al.; Ceramics International, 44, 16915, 2018.

주체108(2019)년 6월 5일 원고접수

Study on the Volume Fraction of Binder in the cBN Sintering Body

Ri Yong Sop, Ri Chang Nam

In this paper we have investigated the dependence of the volume fraction of the cBN binder on cBN particle size in cBN sintering body with a given fracture toughness.

Key words: cBN, sintering

김일성종합대학학보 주체108(2019)년
물리학 제65권 제4호

금강석의 니켈피복물이 수지결합제연마석에서 금강석알갱이의 유지에 주는 영향

김 호 남

위대한 령도자 **김정일**동지께서는 다음과 같이 교시하시였다.

《과학자, 기술자들은 초정밀가공기술을 발전시키고 여러가지 현대적인 수치조종공작기계, 유압기구, 측정계기를 만드는데서 나서는 과학기술적문제와 형단조화, 프레스화, 주물혁명, 용접혁명, 공구혁명을 하는데서 나서는 과학기술적문제를 성과적으로 풀어나가야 합니다.》(《**김정일**선집》 증보판 제11권 137페지)

현재 기계공업, 금속공업부문에서 많이 리용하고있는 수지결합제금강석연마석은 연마석의 갈이성능을 높이기 위하여 금강석알갱이들을 금속피복하여 리용하고있다. 금강석알갱이들의 금속피복은 여러가지 방법으로 할수 있다.[1－4] 전기화학적방법에 의한 금강석의 니켈도금은 공정이 간단하므로 공업적으로 많이 리용되고있다. 그러나 종전의 니켈도금에서는 전처리공정에서 가격이 비싼 $PdCl_2$을 리용하고있다.

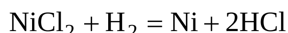
전기화학적도금방법으로 금강석을 금속피복한 경우 니켈피복물이 수지결합제연마석에서 금강석알갱이의 유지에 주는 영향에 대해서는 구체적으로 밝히지 않고있다.

론문에서는 $PdCl_2$을 쓰지 않는 새로운 화학도금방법과 금강석의 니켈피복물이 금강석알갱이의 유지에 주는 영향을 고찰하였다.

화학적방법에 의한 금강석의 니켈도금은 크게 전처리공정과 기본도금공정으로 나누어볼수 있다. 종전의 전처리공정에서는 금강석겉면을 활성화하기 위하여 $SnCl_2$과 $PdCl_2$을 리용하였다.

새로운 방법에 의한 금강석겉면의 화학도금방법은 다음과 같다.

겉면을 깨끗이 세척한 금강석분말을 5질량%의 $NiCl_2$용액속에 넣고 충분히 교반한 후 분말을 꺼내 건조시켰다. 그다음 600℃의 수소분위기속에서 20min동안 유지하였다. 이 과정에 금강석알갱이의 겉면에서는 다음의 환원반응에 의하여 Ni가 석출되여 흡착되게 된다.



$$NiCl_2 + H_2 = Ni + 2HCl$$

금강석겉면에 흡착된 Ni원자들은 기본도금공정에서 환원반응이 일어나게 하는 촉매로 작용한다.

우와 같은 처리를 한 금강석분말을 표와 같은 니켈도금액에서 도금하였다. 도금액의 pH는 9이고 도금온도는 90℃이다. 결과 누런색의 금강석알갱이들이 금속광택의 니켈로 피복되였다.

표. 니켈도금액의 조성과 함량

조성	함량/($g \cdot 100mL^{-1}$)
$NiCl_2 \cdot 6H_2O$	3
$C_3H_4(OH)(COONa)_3 \cdot 3H_2O$	6
H_3BO_3	4
$NaH_2PO_2 \cdot H_2O$	3

이로부터 $SnCl_2$과 $PdCl_2$을 리용하지 않는 새로운 방법으로 금강석겉면을 니켈로 화학도금할수 있다는것을 알수 있다.

다음으로 니켈피복물이 수지결합제금강석연마석에서 금강석알갱이의 유지에 주는 영향을 고찰하였다.

화학도금법으로 니켈피복한 금강석분말을 열처리하고 진공소결로(《HZSL-20》)에서 1Pa의 진공속에서 1h동안 유지한 다음 X선회절분석(《Rigaku-SmartLab》)을 진행하였다.(그림 1)

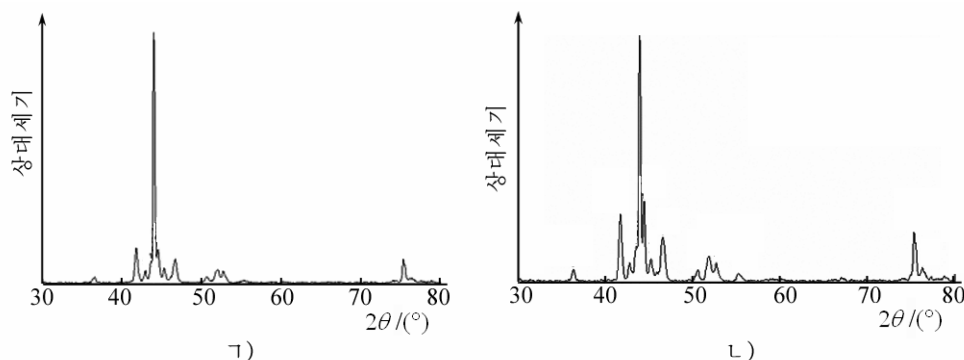


그림 1. 열처리한 니켈피복금강석분말의 XRD도형

ㄱ), ㄴ)는 각각 열처리온도가 500, 750℃인 경우

그림 1에서 보는바와 같이 열처리에 의하여 니켈피복물에서 무정형상으로부터 Ni와 Ni_3P결정에로의 상변화가 일어날뿐 금강석과 니켈피복물사이에 어떤 탄화물도 생성되지 않았다.

EDS를 장비한 SEM(《JSM-6610A, JEOL》)으로 750℃에서 열처리한 금강석－니켈경계에서 니켈과 탄소원소들의 EDS분석을 진행하였다.(그림 2)

그림 2에서 보는바와 같이 750℃에서 열처리할 때 니켈도금층에 탄소원자들이 확산침투하여 약 3원자%의 탄소원자를 포함하는 고용체가 형성되며 탄소의 농도는 니켈도금층속으로 가면서 점차 작아진다. 이로부터 니켈피복한 금강석분말을 750℃에서 열처리하면 금강석과 니켈피복물사이에 야금학적인 결합이 이루어진다는것을 알수 있다.

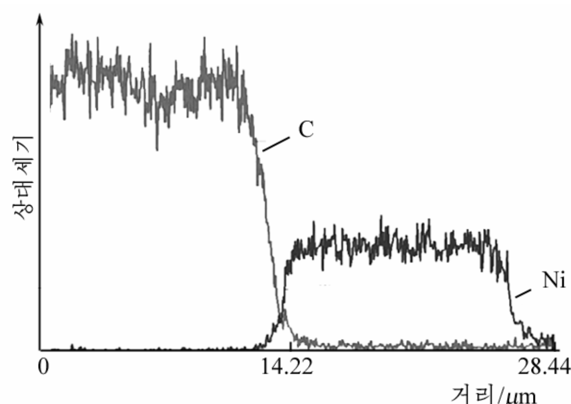


그림 2. 니켈과 탄소원소들의 EDS분석

금강석과 니켈피복물, 수지결합제로 된 계에서 금강석알갱이의 유지에 주는 금속피복물의 영향을 고찰하였다.

금강석연마석에서 금강석알갱이는 연마과정에 소재로부터 연마면에 평행으로 힘을 받으므로 힘의 방향으로 수지결합제를 압축하게 된다. 한편 금강석알갱이는 금속으로 완전히 둘러싸여져있고 수지결합제와 금속피복물사이의 화학적인 결합[2]에 의하여 연마힘의 방향으로 밀리우지 않게 하는 반대방향의 유지힘을 받게 된다. 다시말하여 수지결합제와 화학적결합을 이룬 니켈금속피막속에서 금강석알갱이는 연마힘에 의하여 밀리우지 않고 수지결합제속에 든든히 유지된다고 말할수 있다.

금속피복물이 금강석알갱이의 유지에 주는 영향을 평가하기 위하여 다음과 같은 모의시험을 진행하였다. 모의시험에서는 금강석알갱이대신 화학적성질이 비슷한 흑연봉을 리용하였다. 전해도금방법으로 흑연봉에 판형태로 부분도금한것과 띠형태로 도금한 흑연봉에 납땜한 선에 의하여 흑연봉의 유지세기를 측정하였다.(그림 3) 여기서 납땜한 선의 당김힘은 수지결합제가 화학결합에 의하여 니켈피복물을 당기는것으로 볼수 있으며 고정틀에 의한 흑연봉의 당김은 연마과정에 소재로부터 금강석알갱이가 받는 힘으로 볼수 있다. 당김시험은 도금층에 납땜한 선을 당기면서 도금층이 떨어질 때의 힘을 떨어진 도금층의 자름면으로 나누어 평가하였다.

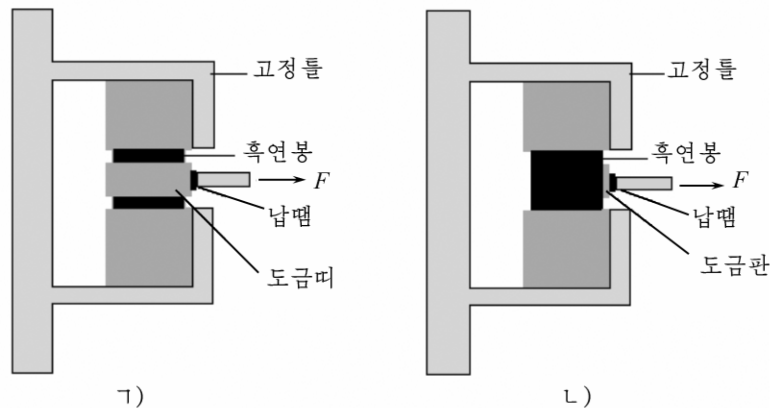


그림 3. 니켈도금한 흑연봉의 유지세기를 측정하기 위한 원리도
ㄱ) 띠도금, ㄴ) 부분도금

모의시험결과 약 20μm의 두께로 부분도금한 경우에 당김세기값은 약 0.17MPa이며 띠도금한 경우에 당김세기값은 약 5MPa로서 부분도금한 경우에 비하여 거의 30배나 크다. 결국 니켈도금한 금강석은 금속피복물의 기계력학적인 유지힘을 더 받는다.

화학도금법과 전기화학도금법에 의하여 니켈피복한 금강석알갱이들의 겉면상태를 그림 4에 보여주었다.

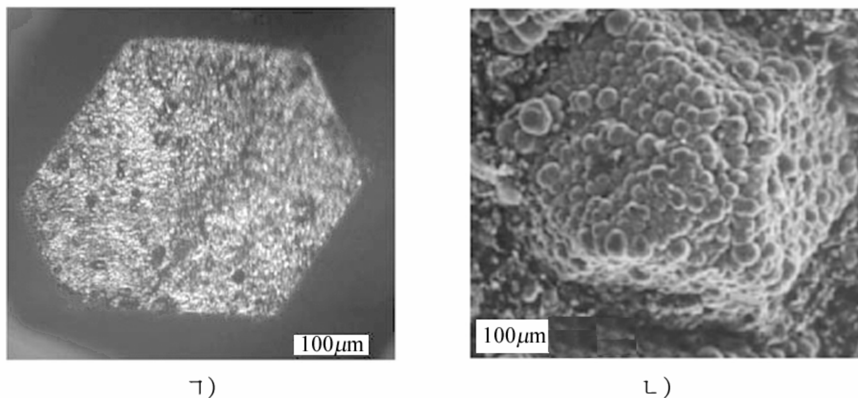


그림 4. 니켈피복한 금강석알갱이들의 겉면상태
ㄱ) 화학도금한 금강석, ㄴ) 전기화학도금한 금강석

그림 4에서 보는바와 같이 화학도금한 금강석알갱이의 겉면은 매끈하지만 전기화학

도금법에 의하여 니켈피복한 금강석알갱이들의 겉면은 거칠고 울퉁불퉁하다. 이러한 겉면상태는 니켈피복물과 수지결합제사이의 접촉면적을 증가시키며 니켈피복물이 수지결합제속에서 앙카의 역할을 함으로써 금강석이 수지결합제속에 더 든든히 유지되게 한다. 한편 전기화학적방법에 의하여 피복률이 50% 되게 니켈피복한 금강석분말을 750℃에서 열처리하였을 때 니켈피복금강석수지연마석의 내마모성은 니켈피복하지 않은 연마석에 비하여 14배나 높았다.

맺 는 말

금강석의 새로운 화학도금방법을 확립하고 수지결합제금강석연마석에서 금강석알갱이의 니켈피복물이 금강석알갱이의 유지에 주는 영향을 밝혔다.

전기화학적방법에 의하여 니켈도금한 금강석분말을 750℃에서 열처리할 때 금강석과 니켈피복물사이의 기계력학적결합과 야금학적결합, 니켈피복물과 수지결합제사이의 화학적결합, 니켈피복층의 겉면거칠음효과들에 의하여 금강석알갱이들이 수지결합제속에 든든히 유지된다.

참 고 문 헌

[1] **김일성**종합대학학보(자연과학), 60, 7, 53, 주체103(2014).
[2] **김일성**종합대학학보(자연과학), 60, 11, 37, 주체103(2014).
[3] N. Yoshihara et al.; Int. J. Abrasive Technology, 1, 1, 136, 2007.
[4] M. K. Tripathi et al.; Int. J. Electrochem. Sci., 8, 3454, 2013.

주체108(2019)년 6월 5일 원고접수

Effects of Ni Coating of Diamond on the Retention of Diamond Grain in the Resin-Bonded Wheel

Kim Ho Nam

In the paper new electroless Ni plating method was established and the effects of Ni coating of diamond grain on its retention in the resin-bonded wheel were studied.

Key words: diamond, nickel, coating, retention

김일성종합대학학보 주체108(2019)년
물리학 제65권 제4호

초음파화상에서 웨블레트잡음제거와 적응위너 려파기를 결합한 얼룩잡음제거방법

김 경 일

위대한 령도자 **김정일**동지께서는 다음과 같이 교시하시였다.

《과학연구기관들과 과학자, 기술자들은 우리 나라의 실정에 맞고 나라의 경제발전에 이바지할수 있는 과학기술적문제를 더 많이 풀어야 하겠습니다.》(《**김정일**선집》 증보판 제13권 173페지)

오염된 화상의 잡음제거는 화상처리에서 나서는 일반적이며 중요한 문제이다. 초음파화상을 비롯한 화상들은 흔히 화상자료를 얻고 전송하며 변환하는 과정에 얼룩잡음과 같은 여러가지 잡음에 의하여 오염된다. 얼룩잡음은 초음파화상에서 고유한 잡음이며 초음파화상의 질을 떨어뜨려 의학부문에서 병진단을 어렵게 한다. 특히 초음파화상에 존재하는 얼룩잡음은 화상의 분할과 특징추출, 식별과 같은 화상처리를 복잡하게 한다. 그러므로 얼룩잡음제거는 초음파화상을 리용한 병진단능력과 수중목표식별능력을 높이는데서 매우 중요하다. 대표적인 얼룩잡음제거방법들은 평균려파기와 비평균중간려파기, 위너려파기와 같은 공간령역려파방법들이다.[1]

최신화상잡음제거방법들은 웨블레트령역에서 진행한다.[1－3] 웨블레트리론은 신호와 화상처리, 통신체계들, 생물학적화상처리, 레이다, 공기음향학, 리론수학, 조종체계와 같은 많은 분야에서 리용되고있다. 웨블레트변환은 국부특징들과 예리한 변두리특징을 보존하는 특성을 가진다. 웨블레트변환은 공간과 주파수령역에서 좋은 국부특성을 제공하기때문에 초음파화상에 존재하는 얼룩잡음을 제거하고 화상의 특성을 잘 보존한다. 그러나 공간령역기술들은 변두리들이 선명하지 못하고 중요한 화상정보들이 손실되는것과 같은 일부 문제들이 있다. 그리하여 초음파화상의 얼룩잡음제거는 화상의 정보손실을 최소로 하고 얼룩잡음을 최대로 낮추는 방법을 찾을것을 요구한다.

론문에서는 웨블레트잡음제거방법과 적응위너려파방법을 결합한 초음파화상의 얼룩잡음제거방법을 제기하고 초음파화상의 얼룩잡음제거성능을 고전적인 방법들과 비교하여 평가하였다.

1. 웨블레트잡음제거와 적응위너려파방법

론문에서는 초음파화상의 정보손실을 최소로 하고 얼룩잡음을 최대로 낮추기 위하여 공간려파와 웨블레트변환에 기초한 잡음제거방법들을 결합하였다.

원천초음파화상 $I_U(m,\ n)$에 얼룩잡음 $N(m,\ n)$이 섞인 초음파화상 $I_{USP}(m,\ n)$은 다음과 같이 표시한다.

$$I_{USP}(m,\ n) = I_U(m,\ n) + N(m,\ n) \tag{1}$$

여기서 m, n 은 각각 초음파화상화소행렬자료의 행과 렬번호이다.

초음파화상잡음제거의 목적은 $I_{USP}(m, n)$ 으로부터 얼룩잡음을 제거하고 원천초음파화상인 $I_U(m, n)$ 을 얻는것이다. 웨블레트잡음제거와 공간려파를 결합한 초음파화상잡음제거방법은 다음과 같은 단계로 이루어진다.

단계 1: 초음파화상자료를 띠염웨블레트변환한다.

단계 2: 띠염웨블레트변환자료를 턱값처리한다.

단계 3: 적응위너려파방법을 리용하여 적응려파한다.

단계 4: 웨블레트턱값처리하고 공간려파한 결수들을 가지고 거꿀띠염웨블레트변환하여 얼룩잡음제거한 초음파화상을 얻는다.

1) 웨블레트잡음제거방법

웨블레트려파기는 얼룩잡음과 가우스잡음을 잘 제거한다. 잡음섞인 초음파화상의 띠염웨블레트변환결수들중에서 값이 작은 결수들은 잡음을 나타내고 값이 큰 결수들은 화상의 정보를 반영한다. 상세화부분대역에 있는 값이 작은 결수들을 웨블레트턱값처리기술을 리용하여 수정하며 한편 근사화부분대역에 있는 값이 큰 결수들은 변경하지 않는다. 턱값처리기술에서는 턱값과 턱값함수의 선택이 중요하다.

일반적인 웨블레트잡음제거방법은 다음과 같다.

먼저 잡음섞인 초음파화상자료를 띠염웨블레트변환한다.

$\Psi(m, n)$ 을 웨블레트함수라고 하면 j 번째 분해준위에서 웨블레트함수는 다음과 같다.

$$\Psi_{2^j}(m, n) = \frac{1}{2^j} \cdot \Psi\left(\frac{m}{2^j}, \frac{n}{2^j}\right) \tag{2}$$

j 번째 분해준위에서 초음파화상자료 $I_{USP}(m, n)$ 의 띠염웨블레트변환은 다음과 같다.

$$W(m, n) = I_{USP}(m, n) * \Psi_{2^j}(m, n) = \frac{1}{2^j} \cdot I_{USP}(m, n) * \Psi\left(\frac{m}{2^j}, \frac{n}{2^j}\right) \tag{3}$$

여기서 $W(m, n)$ 은 초음파화상의 띠염웨블레트변환결수, *은 중첩적분연산자를 의미한다.

다음 띠염웨블레트변환자료의 상세화부분대역결수들에 턱값을 적용하여 턱값처리한다.

론문에서 리용한 턱값함수는 Soft턱값함수이다.

$$\hat{W}_{\text{soft}}(m, n) = \begin{cases} W(m, n) - T, & W(m, n) \geq T \\ W(m, n) + T, & W(m, n) \leq -T \\ 0, & |W(m, n)| < T \end{cases} \tag{4}$$

여기서 $W(m, n)$ 과 $\hat{W}(m, n)$ 은 각각 초음파화상의 띠염웨블레트변환결수와 턱값처리한 띠염웨블레트변환결수이며 T 는 턱값(일반턱값)이다.

$$T = \sigma_n \sqrt{2 \log L} \tag{5}$$

$$\sigma_n = \frac{median[\{W(m, n) : m, n\} \in HH]}{0.674\ 5} \tag{6}$$

여기서 L은 전체 화소수, σ_n 은 잡음의 표준편차, HH 는 초음파화상의 잡음부분대역이다.

다음 턱값처리한 웨블레트결수들을 가지고 거꿀띠염웨블레트변환을 진행하여 잡음을 제거한 화상을 얻는다.

2) 적응위너려파방법

적응위너려파기는 비평균적응공간려파기이다. 이 려파기는 중간려파기와 달리 잡음의 종류에 관계없이 일반적인 잡음제거에 합리적이다. 적응위너려파기는 평균려파기의 한 종류이며 화상을 적응적으로 처리한다. 즉 화상의 변동이 크면 작게 평활화하고 변동이 작으면 크게 평활화한다.

적응위너려파기는 초음파화상의 매개 화소주위의 평균값 μ와 변동 σ^2을 다음과 같이 추정한다.

$$\mu = \frac{1}{MN}\sum_{m,\ n\in\eta} I_{USP}(m,\ n) \tag{7}$$

$$\sigma^2 = \frac{1}{MN}\sum_{m,\ n\in\eta} [I_{USP}^2(m,\ n) - \mu^2] \tag{8}$$

여기서 려파하려는 국부이웃면 η의 크기는 $M \times N$이며 $a(m,\ n)$은 면 η를 둘러싼 복원하려는 모든 화소이다.

적응위너려파기는 다음과 같이 실현한다.

$$I_{WF}(m,\ n) = \mu + \frac{\sigma^2 - \upsilon^2}{\sigma^2}[I_{USP}(m,\ n) - \mu] \tag{9}$$

여기서 υ^2은 잡음변동이다. 만일 잡음변동이 주어지지 않으면 위너려파기는 추정한 전체 국부변동의 평균값을 리용한다.

2. 실험결과

웨블레트잡음제거와 적응위너려파기를 결합한 초음파화상의 얼룩잡음제거방법의 성능을 고전적인 잡음제거방법들과 비교하여 평가하였다.

모의실험에 리용한 원천초음파화상은 초음파화상입력장치(《Sonix OP》)로 얻은 복부초음파화상이며 splab.cz/en/download/database/ultrasound에서 내리적재하였다. 여러가지 얼룩잡음제거방법들의 성능을 평가하기 위하여 초음파화상에 여러가지 준위의 얼룩잡음을 추가하고 MATLAB R2017a를 리용하여 모의실험을 진행하였다. 모의실험에 리용한 초음파화상은 크기가 164×208이며 8bit회색척도화상이다. 웨블레트잡음제거에 리용한 모웨블레트는 'sym4'이며 분해준위는 2이다.

초음파화상의 얼룩잡음제거에 대한 고전적인 방법들과 론문에서 제기한 방법의 잡음제거성능을 정량적으로 평가하기 위하여 각이한 준위의 얼룩잡음들을 초음파화상에 추가하고 그것의 얼룩잡음제거성능평가값들을 고찰하였다.(표)

MSE값이 작을수록 그리고 PSNR, ISNR값이 클수록 초음파화상의 얼룩잡음을 효과적으로 감소시키며 CoC값이 클수록 초음파화상의 특징보관능력이 좋다.

표에서 보는바와 같이 각이한 얼룩잡음준위에서 웨블레트잡음제거와 적응위너려파를 결합한 방법의 MSE가 가장 작고 PSNR, ISNR, CoC값이 가장 높다. 이것은 웨블레트잡음제거와 적응위너려파를 결합한 방법이 다른 잡음제거방법들보다 성능이 제일 좋다는것을 보여준다.

표. 여러가지 잡음제거방법들의 성능평가

잡음 준위	잡음제거방법	성능평가지표			
		MSE	PSNR	ISNR	CoC
0.05	평균려파	97.55	1 365.11	277.19	135.50
	중간려파	98.30	1 354.69	275.07	135.22
	위너려파	150.66	883.91	179.48	134.14
	웨블레트잡음제거	113.68	1 171.50	237.88	134.99
	웨블레트+평균려파	101.09	1 317.42	267.50	135.30
	웨블레트+중간려파	93.63	1 422.28	288.80	135.44
	웨블레트+위너려파	57.96	2 297.78	466.57	136.09
0.10	평균려파	183.40	726.13	147.44	135.06
	중간려파	167.27	796.12	161.65	134.79
	위너려파	283.50	469.74	95.38	132.86
	웨블레트잡음제거	226.95	586.78	119.15	134.04
	웨블레트+평균려파	142.74	932.94	189.43	135.12
	웨블레트+중간려파	136.32	976.91	198.36	135.33
	웨블레트+위너려파	106.84	1 246.43	253.09	135.86
0.15	평균려파	262.89	506.58	102.86	134.66
	중간려파	232.51	572.76	116.30	134.45
	위너려파	404.18	329.49	66.90	132.19
	웨블레트잡음제거	327.13	407.09	82.66	133.48
	웨블레트+평균려파	179.49	741.96	150.66	135.04
	웨블레트+중간려파	174.92	761.31	154.59	135.31
	웨블레트+위너려파	153.21	869.18	176.49	135.70
0.20	평균려파	310.55	428.83	87.07	134.36
	중간려파	295.31	450.95	91.57	133.83
	위너려파	512.55	259.82	52.76	131.07
	웨블레트잡음제거	421.78	315.74	64.11	132.55
	웨블레트+평균려파	217.20	613.12	124.49	134.81
	웨블레트+중간려파	215.08	619.16	125.72	134.99
	웨블레트+위너려파	190.21	700.13	142.16	135.48

이와 같이 웨블레트잡음제거와 적응위너려파를 결합한 초음파화상의 얼룩잡음제거방법은 고전적인 방법들보다 잡음제거성능이 개선되였다.

맺 는 말

초음파화상에서 웨블레트잡음제거와 적응위너려파기를 결합한 얼룩잡음제거방법을 제기하고 그것의 잡음제거성능을 고전적인 방법들과 비교하여 평가하였다. 모의실험결과들은 다른 고전적인 방법들보다 새로운 방법의 잡음제거성능이 얼룩잡음제거와 변두리보관에서 좋다는것을 보여주었다.

참 고 문 헌

[1] D. Bhonsle et al.; International Journal of Pure and Applied Mathematics, 118, 18, 1109, 2018.
[2] R. Bouchouareb et al.; International Journal of Bio-Science and Bio-Technology, 6, 6, 29, 2014.
[3] R. Vanithamani et al.; International Journal of Engineering and Technology, 5, 6, 5098, 2014.

주체108(2019)년 6월 5일 원고접수

Despeckling Method Combined Wavelet Denoising and Adaptive Wiener Filter in Ultrasound Images

Kim Kyong Il

We proposed the despeckling method combined wavelet denoising and adaptive wiener filter in ultrasound images, and evaluated its denoising performance compared with the classical methods. Simulation results show that the denoising performance of new method was better than other classical methods in terms of despeckling and edge preservation.

Key words: ultrasound image, wavelet denoising, spatial filtering, speckle noise

김일성종합대학학보 주체108(2019)년
물리학 제65권 제4호

유한전기회로요소모형(FECEM)을 리용한 볼트조임랑쥬뱅진동자의 최량구조설계

윤철혁, 박명일

볼트조임랑쥬뱅진동자는 흔히 에네르기를 집초시키거나 나르는 역할을 하는 여러가지 형태의 폰과 결합되여 초음파세척이나 초음파용접, 초음파기계가공, 음향화학, 수중통신, 초음파수술과 같은 각이한 응용분야들에서 널리 리용된다.

폰의 구조를 합리적으로 설계하는것은 매질속에서 복사출력이 최대인 진동자를 설계하는데서 대단히 중요한 문제로 나선다.

선행연구들[1, 2, 4]에서는 메존(Mason)등가회로를 비롯한 전기회로리론과 유한요소해석(FEA)리론을 리용하여 볼트조임랑쥬뱅진동자의 구조를 설계하고 그것의 성능을 해석하였지만 보다 발전된 전기회로리론인 유한전기회로요소모형(FECEM: Finite Electrical Circuit Element Modeling)에 기초하여 매질속에서의 복사출력이 최대인 진동자의 기하학적구조를 설계하는 방법에 대하여서는 구체적으로 밝히지 않았다. 유한전기회로요소모형[3]은 진동자를 설계하고 해석할수 있는 두가지 기능을 다같이 갖춘 전기회로리론으로서 진동자의 기하학적구조를 설계할뿐아니라 응력분포나 출력손실과 같은 파라메터들을 해석할수 있는 우점을 가지고있다.

우리는 유한전기회로요소모형을 리용하여 주어진 동작주파수(20kHz)를 만족하면서도 매질속에서의 복사출력이 최대인 볼트조임랑쥬뱅진동자의 기하학적구조를 설계하고 유한요소해석방법(FEM)을 리용하여 비교검증하였다.

최량으로 설계하려는 랑쥬뱅진동자의 기하학적구조는 그림 1과 같이 압전사기, 앞질량부와 뒤질량부로 구성되여있다.

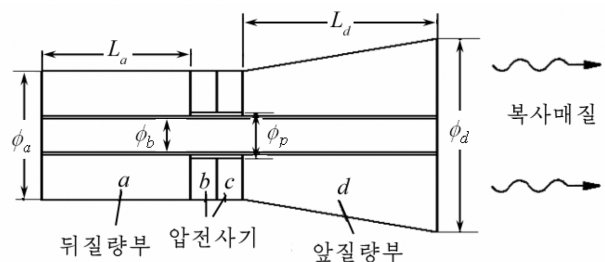


그림 1. 볼트조임랑쥬뱅진동자의 기하학적구조

볼트조임랑쥬뱅진동자의 뒤질량부(*a*)는 직경이 $\phi_a = 50$mm 이고 길이가 L_a 인 철재료로, 앞질량부(*d*)는 앞머리부와 뒤머리부의 직경이 각각 $\phi_d = 80$mm , $\phi_a = 50$mm 이고 길이가 L_d 인 알루미니움재료로, 원판형압전사기(*b*, *c*)는 외경과 내경이 각각 $\phi_a = 50$mm , $\phi_p = 13$mm 이고 두께가 $t_p = 5$mm 인 PZT-M재료로, 볼트는 직경 $\phi_b = 10$mm 인 불수강재료로 되여있다. 그리고 진동계는 뒤면복사매질이 공기이고 앞면복사매질은 물로서 한면복사계이다.

유한전기회로요소모형을 리용하여 매질속에서 복사하는 랑쥬뱅진동자의 앞면(복사면)과 뒤면의 진동속도비가 최대로 되는 앞질량부와 뒤질량부의 기하학적크기를 설계하였다.

그림 2에 볼트조임랑쥬뱅진동자의 유한전기회로요소모형을 보여주었다.

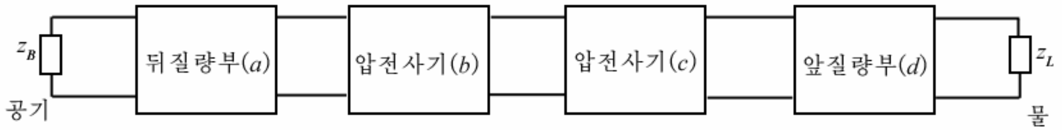


그림 2. 볼트조임랑쥬뱅진동자의 유한전기회로요소모형

그림 2의 매 단자들에서 힘과 진동속도사이에는 다음의 식이 성립한다.

$$\left.\begin{array}{l} F_1^a = -z_B \cdot \upsilon_1^a \\ \begin{bmatrix} F_1^a \\ \upsilon_1^a \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A^a & B^a \\ C^a & D^a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_2^a \\ \upsilon_2^a \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} F_1^b \\ \upsilon_1^b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A^b & B^b \\ C^b & D^b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_2^b \\ \upsilon_2^b \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} A^b-1 & B^b \\ C^b & D^b-1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -NV \\ 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} F_1^c \\ \upsilon_1^c \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A^c & B^c \\ C^c & D^c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_2^c \\ \upsilon_2^c \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} A^c-1 & B^c \\ C^c & D^c-1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -NV \\ 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} F_1^d \\ \upsilon_1^d \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A^d & B^d \\ C^d & D^d \end{bmatrix} \begin{bmatrix} F_2^d \\ \upsilon_2^d \end{bmatrix} \\ F_1^d = -z_L \cdot \upsilon_1^d \end{array}\right\} \tag{1}$$

여기서 F_i^m, υ_i^m (i=1, 2; m=a, b, c, d)은 물리적으로 볼 때 원기둥형 또는 원추형진동요소경계면들에서의 힘과 진동속도이며 $ABCD$행렬식은 전저항과 다음의 관계가 있다.[3]

$$\left.\begin{array}{l} \begin{bmatrix} A^m & B^m \\ C^m & D^m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} \mathrm{z}_{11}^m / \mathrm{z}_{21}^m & (\mathrm{z}_{11}^m \mathrm{z}_{22}^m - \mathrm{z}_{12}^m \mathrm{z}_{21}^m)/\mathrm{z}_{21}^m \\ 1/\mathrm{z}_{21}^m & \mathrm{z}_{22}^m / \mathrm{z}_{21}^m \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} \mathrm{z}_{11}^m & \mathrm{z}_{12}^m \\ \mathrm{z}_{21}^m & \mathrm{z}_{22}^m \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A^m / C^m & (A^m D^m - B^m C^m)/C^m \\ 1/C^m & D^m / C^m \end{bmatrix} \end{array}\right\} \tag{2}$$

여기서 z_{11}^m, z_{12}^m, z_{21}^m, z_{22}^m은 매개 요소부분들의 전저항이다.

그림 2에서 진동자의 앞뒤면에서의 매질복사저항은 다음과 같다.

$$z_L = \rho_L c_L s_d \{[1-2J_1(k_L\phi_d)/(k_L\phi_d)] + j2S_1(k_L\phi_d)/(k_L^2 \cdot \phi_d^2)\} \tag{3}$$

$$z_B = \rho_B c_B s_a \{[1-2J_1(k_L\phi_a)/(k_L\phi_a)] + j2S_1(k_L\phi_a)/(k_L^2 \cdot \phi_a^2)\} \tag{4}$$

여기서 ρ_m, c_m, s_m, k_m, L_m ($m = a,\ b,\ c,\ d$)은 진동자를 구성하는 부분품재료들의 밀도, 음속도, 가로자름면적, 파수, 길이이며 J_1은 1차베쎌함수, S_1은 1차스트르베함수이다.

한편 식 (1)로부터 다음의 식이 얻어진다.

$$\begin{bmatrix} F_1^a \\ \upsilon_1^a \end{bmatrix} = T_1 \begin{bmatrix} F_2^d \\ \upsilon_2^d \end{bmatrix} + T_2 \begin{bmatrix} -NV \\ 0 \end{bmatrix} \tag{5}$$

여기서 결수 T_1, T_2는 각각 다음과 같다.

$$T_1 = \begin{bmatrix} A^1 & B^1 \\ C^1 & D^1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A^a & B^a \\ C^a & D^a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A^b & B^b \\ C^b & D^b \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A^c & B^c \\ C^c & D^c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A^d & B^d \\ C^d & D^d \end{bmatrix}$$

$$T_2 = \begin{bmatrix} A^2 & B^2 \\ C^2 & D^2 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} A^a & B^a \\ C^a & D^a \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A^b - 1 & B^b \\ C^b & D^b - 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} A^c - 1 & B^c \\ C^c & D^c - 1 \end{bmatrix}$$

다음으로 진동자의 공진주파수를 $|T_1| = 0$ 으로부터 구하고 앞뒤질량부의 길이에 따르는 진동자앞뒤복사면에서의 진동속도비 $\upsilon_2^d / \upsilon_1^a$ 를 고찰하였다. ANSYS를 리용하여 복사매질속에서 볼트조임랑쥬뱅진동자의 앞뒤질량부의 길이변화에 따르는 진동속도비를 유한전기회로요소모형에 기초한 등가회로리론결과와 비교하였다. ANSYS해석에 리용된 볼트조임랑쥬뱅진동자에서 압전사기와 앞뒤질량부들의 요소형태로는 축대칭2차원요소형태인 Plane13과 Plane42를 리용하였고 진동자의 전체 요소분할수는 약 3만개로 주었으며 경계조건으로 압전사기에 1V의 구동전압을 걸어주었다.

진동자앞뒤복사면에서의 진동속도비 $\upsilon_2^d / \upsilon_1^a$ 가 최대로 되는 앞뒤질량부의 길이를 구하기 위하여 주파수방정식 $|T_1| = 0$ 을 만족하는 동작주파수 20kHz에서 앞뒤질량부의 길이변화에 따르는 진동속도비의 변화곡선을 고찰하였다.(그림 3)

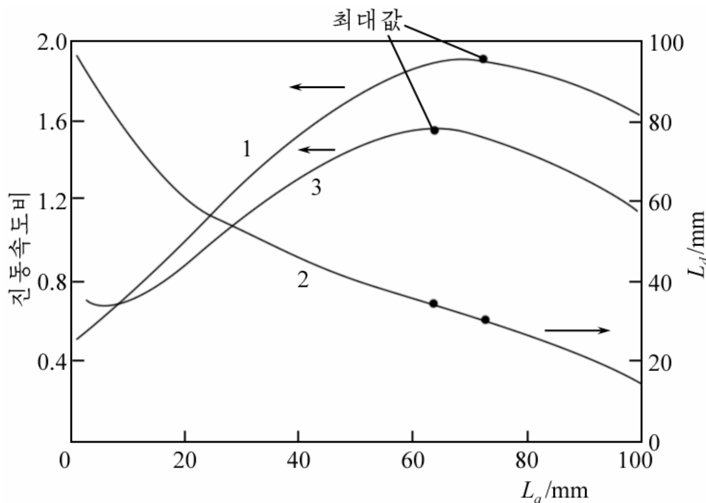


그림 3. 앞뒤질량부의 길이변화에 따르는 진동속도비의 변화곡선
1, 3은 유한전기회로요소모형과 유한요소해석으로 얻은 진동속도비,
2는 앞뒤질량부의 길이사이관계

그림 3에서 보는바와 같이 유한전기회로요소모형을 리용하여 구한 매질속에서 한면복사하는 볼트조임랑쥬뱅진동자의 앞뒤면의 진동속도비는 앞뒤질량부의 길이가 각각 $L_d = 30\text{mm}$, $L_a = 72\text{mm}$ 일 때 최대값을 가지며 유한요소해석을 리용하여 구한 진동속도비는 앞뒤질량부의 길이가 각각 $L_d = 34\text{mm}$, $L_a = 64\text{mm}$ 일 때 최대값을 가진다.

유한전기회로요소모형과 유한요소해석으로 구한 진동속도비의 차이는 1차원등가회로리론인 유한전기회로요소모형보다 2차원의 유한요소해석프로그람을 리용하는것이 더 현실적이며 구체적인 구조를 반영하기때문이라고 본다.

맺 는 말

매질속에서 최대복사출력을 보장하기 위하여 20kHz의 동작주파수를 만족하면서도 앞뒤면의 진동속도비가 최대인 볼트조임랑쥬뱅진동자의 앞질량부와 뒤질량부의 기하학적크기를 유한전기회로요소모형에 기초한 등가회로해석과 유한요소해석으로부터 구하고 비교검증하였다. 복사출력이 최대인 볼트조임랑쥬뱅진동자의 기하학적구조를 설계하는 리론을 반파장길이의 진동계에뿐만아니라 여러파장길이의 진동계에도 적용할수 있는 방법론을 주었다.

참 고 문 헌

[1] S. L. Peshkovsky et al.; Ultrasonics Sonochemistry, 14, 314, 2007.
[2] Z. Fu et al.; Ultrasonics, 52, 578, 2012.
[3] F. Ebrahimi; Advances in Piezoelectric Transducers, Intech, 1～15, 2011.
[4] P. Kluk; Acta Physica Polonica, A 127, 3, 719, 2015.

주체108(2019)년 6월 5일 원고접수

Optimum Structural Design of Bolted Langevin Transducer Based on Finite Electrical Circuit Element Modeling(FECEM)

Yun Chol Hyok, Pak Myong Il

We designed an optimal geometric structure of BLT with maximum radiating power for the given operating frequency of 20kHz in the medium using FECEM and then identified its acoustic characteristics using FEM.

Key words: FECEM, bolted Langevin transducer, radiating power

김일성종합대학학보 주체108(2019)년
물리학 제65권 제4호

제 1 원리전에네르기에 기초한 용매화된 Cs^{+}, Pb^{2+}, I^{-}의 화학포텐샬평가방법

계윤혁, 유철준

위대한 령도자 **김정일**동지께서는 다음과 같이 교시하시였다.

《새 재료부문을 발전시키지 않고서는 전자공업을 주체적으로 발전시킬수 없고 기계공업의 현대화를 실현할수 없으며 최신과학기술을 전반적으로 발전시킬수 없습니다.》

(《**김정일**선집》 증보판 제15권 487페지)

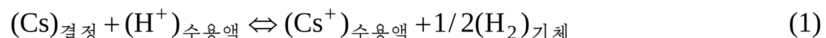
최근에 습기와 열안정성이 약한 유기－무기혼성페로브스카이트형재료의 결함을 극복하기 위하여 유기양이온자리에 Cs^{+}이 치환된 무기할로겐페로브스카이트형재료 $CsPbI_3$에 대한 연구가 심화되고있다.[1, 2]

$CsPbI_3$은 일반적으로 유기용매를 리용한 액상법으로 제조되며 따라서 재료의 결정성장과 상안정화에서 구성이온들인 Cs^{+}, Pb^{2+}, I^{-}의 열력학적특성이 큰 영향을 미친다. 특히 열력학적평형상태에서 재료의 결함특성을 해명하기 위해서는 주위용액속에 존재하는 이온들의 화학포텐샬을 제1원리전에네르기값에 기준하여 정량적으로 평가하여야 한다. 실례로 제1원리결함열력학[3]을 $CsPbI_3$의 제조반응에 적용할 때 반응온도와 이온농도로부터 화학포텐샬을 계산하고 결함형성에네르기를 얻을수 있다.

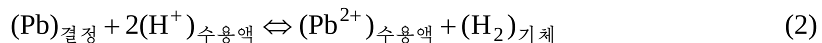
우리는 무기페로브스카이트형태양전지재료 $CsPbI_3$의 액상합성반응때 해당 온도와 농도에서 용매화된 Cs^{+}, Pb^{2+}, I^{-}의 화학포텐샬을 제1원리전에네르기계산에 기초하여 정량적으로 평가하기 위한 방법을 고찰하였다.

1. 화학포텐샬평가방법

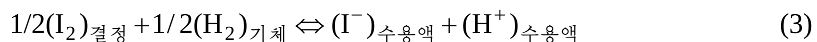
수용액에서 이온들의 형성자유에네르기는 다음의 반응에 의하여 정의된다.[4]



$$(\mathrm{Cs})_{결정}+(\mathrm{H}^{+})_{수용액} \Leftrightarrow (\mathrm{Cs}^{+})_{수용액}+1/2(\mathrm{H}_2)_{기체} \quad (1)$$



$$(\mathrm{Pb})_{결정}+2(\mathrm{H}^{+})_{수용액} \Leftrightarrow (\mathrm{Pb}^{2+})_{수용액}+(\mathrm{H}_2)_{기체} \quad (2)$$



$$1/2(\mathrm{I}_2)_{결정}+1/2(\mathrm{H}_2)_{기체} \Leftrightarrow (\mathrm{I}^{-})_{수용액}+(\mathrm{H}^{+})_{수용액} \quad (3)$$

열력학적표준압력(1기압)을 웃첨자 0을 붙여 표시하면 반응물과 생성물들의 화학포텐샬은 다음의 방정식을 만족시킨다.

$$(\mu_{\mathrm{Cs}}^{+})^{0}_{수용액}(T)-(\mu_{\mathrm{H}}^{+})^{0}_{수용액}(T)=(\Delta G_{\mathrm{f}}^{\mathrm{Cs}^{+}})^{0}_{수용액}(T)+(\mu_{\mathrm{Cs}})^{0}_{결정}(T)-1/2(\mu_{\mathrm{H}_2})^{0}_{기체}(T) \quad (4)$$

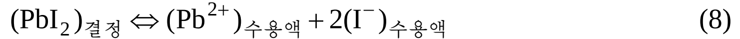
$$(\mu_{\mathrm{Pb}}^{2+})^{0}_{수용액}(T)-2(\mu_{\mathrm{H}}^{+})^{0}_{수용액}(T)=(\Delta G_{\mathrm{f}}^{\mathrm{Pb}^{2+}})^{0}_{수용액}(T)+(\mu_{\mathrm{Pb}})^{0}_{결정}(T)-(\mu_{\mathrm{H}_2})^{0}_{기체}(T) \quad (5)$$

$$(\mu_{\mathrm{I}}^{-})^{0}_{수용액}(T)+(\mu_{\mathrm{H}}^{+})^{0}_{수용액}(T)=(\Delta G_{\mathrm{f}}^{\mathrm{Cs}^{+}})^{0}_{수용액}(T)+(\mu_{\mathrm{I}_2})^{0}_{결정}(T)+(\mu_{\mathrm{H}_2})^{0}_{기체}(T) \quad (6)$$

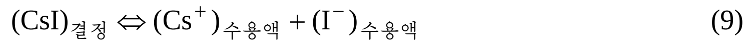
여기서 이온들의 형성에네르기는 실험자료로 주어지고 결정과 기체상태의 화학포텐샬들은 제1원리전에네르기와 실험값들을 아래와 같이 결합시켜 얻는다.

$$\mu^0(T)=H^0(T)-TS^0(T)=H^0(0)+H^0(T)-H^0(0)\cong E(DFT)+\Delta\mu^0(T) \quad (7)$$

식 (4)－(6)에서 방정식의 왼변에는 모르는 변수가 4개 들어있으므로 정확한 풀이를 얻자면 1개의 방정식이 더 있어야 한다. 그러나 어떠한 이온교환반응으로써도 우의 방정식들과 1차독립인 식을 얻을수 없다. 그러므로 풀이를 얻자면 근사풀이방법을 리용하여야 하며 이를 위한 추가적인 조건들로 PbI_2과 CsI의 해리반응을 선택한다.



$$(PbI_2)_{결정}\Leftrightarrow(Pb^{2+})_{수용액}+2(I^-)_{수용액} \quad (8)$$



$$(CsI)_{결정}\Leftrightarrow(Cs^+)_{수용액}+(I^-)_{수용액} \quad (9)$$

해리반응의 깁즈자유에네르기변화는 이온과 결정들의 형성자유에네르기에 의하여 다음과 같이 표시된다.

$$(\Delta G_{해리}^{PbI_2})^0(T)=(\Delta G_f^{Pb^{2+}})^0_{수용액}(T)+2(\Delta G_f^{I^-})^0_{수용액}(T)-(\Delta G_f^{PbI_2})^0_{결정}(T) \quad (10)$$

$$(\Delta G_{해리}^{CsI})^0(T)=(\Delta G_f^{Cs^+})^0_{수용액}(T)+(\Delta G_f^{I^-})^0_{수용액}(T)-(\Delta G_f^{CsI})^0_{결정}(T) \quad (11)$$

이로부터 아래의 식들이 더 첨부된다.

$$(\mu_{Pb}^{2+})^0_{수용액}(T)+2(\mu_I^-)^0_{수용액}(T)=(\Delta G_{해리}^{PbI_2})^0(T)+(\mu_{PbI_2})^0_{결정}(T) \quad (12)$$

$$(\mu_{Cs}^{+})^0_{수용액}(T)+(\mu_I^-)^0_{수용액}(T)=(\Delta G_{해리}^{CsI})^0(T)+(\mu_{CsI})^0_{결정}(T) \quad (13)$$

식 (4)－(6), (12), (13)을 속박조건을 고려한 최소2제곱법으로 풀면 수화된 이온들의 화학포텐샬이 얻어진다. 속박은 우선 안정한 $CsPbI_3$에서 빈자리결함들의 형성에네르기가 0보다 커야 한다는데로부터 나온다.

$$(\mu_I^{q_i})^0_{수용액}(T)\ge E_{체적체}-E[D^{-q_i}]-E_{보정} \quad (14)$$

다음으로 세가지 이온들의 표준몰랄농도에서 $CsPbI_3$이 충분히 생성된다는 실험적사실로부터 다음의 조건이 얻어진다.

$$(\mu_{Cs}^{+})^0_{수용액}(T)+(\mu_{Pb}^{2+})^0_{수용액}(T)+3(\mu_I^-)^0_{수용액}(T)\ge(\mu_{CsPbI_3})^0_{결정}(T) \quad (15)$$

풀이의 기본오차는 결정고체의 형성에네르기에 대한 실험값과 계산값과의 차이에 기인되므로 이 방법에서 제1원리계산에 대한 음적인 보정이 진행된다는것을 알수 있다. 전자저장소의 화학포텐샬인 페르미에네르기는 식 (14)를 통하여 용매화된 이온들의 화학포텐샬에 반영된다.

2. 용매화된 Cs^+, Pb^{2+}, I^-의 화학포텐샬결정

표준조건에서 금속과 화합물결정 그리고 기체들의 화학포텐샬은 식 (7)을 리용하여 제1원리전에네르기와 유한온도보정값으로부터 얻어진다.(표)

실험자료로 주어진 수화된 이온들과 PbI_2, CsI결정들의 깁즈자유에네르기를 리용하여 PbI_2과 CsI결정의 해리자유에네르기를 계산하면 각각 46, －3.0kJ/mol이다. 속박조건을 주는 식 (14)는 방온도에서 안정한 δ상의 모든 이온들에 적용할수 있다. 그러나 준안정상인 α상에 대해서는 δ상과 비슷한 PbI_6-8면체를 이루고있는 Pb^{2+}과 I^-에 대해서만 적용할수 있다. 또한 같은 몰랄농도에서 Pb^{2+}은 I^-에 비하여 8면체에서 빠져나가기가 어렵다는 사실과 식 (17)을 리용하여 다음의 속박조건을 얻는다.

표. 결정과 기체들의 최적화된 살창상수와 결합길이

물질	상	살창상수와 결합길이/nm		E_{DFT}/eV	$\triangle\mu^0$/eV
		계산값	실험값		
α-$CsPbI_3$	Pm-3m	0.624	0.618	−11.48	−0.11
δ-$CsPbI_3$	Pnma	a=1.042, b=0.475, c=1.766	a=1.043, b=0.479, c=1.776	−11.71	−0.20
PbI_2	P-3m1	a=0.446, c/a=1.70	a=4.56, c/a=1.53	−7.17	−0.34
CsI	Pm3m	0.451	0.457	−4.35	−0.18
Pb	Fm-3m	a=0.493	a=0.495	−3.45	−0.13
Cs	Im-3m	a=0.599	a=0.614	−0.31	−0.18
I_2	Cmca	a=0.751, b=0.438, c=0.963	a=0.718, b=0.471, c=0.981	−1.91	−0.22
I_2	기체	d_{I-I}=0.265 6	d_{I-I}=0.266 6	−1.26	−0.70
H_2	기체	d_{H-H}=0.075 9	d_{H-H}=0.074 1	−6.37	−0.32

$$(\mu_{Cs}^{+})^0_{수용액}(T_r) \geq -6.30\,(eV)$$

$$(\mu_{Pb}^{2+})^0_{수용액}(T_r) \geq -8.97\,(eV)$$

$$(\mu_{I}^{-})^0_{수용액}(T_r) \geq 0.86\,(eV)$$

$$(\mu_{Cs}^{+})^0_{수용액}(T_r) + (\mu_{Pb}^{2+})^0_{수용액}(T_r) + 3(\mu_{I}^{-})^0_{수용액}(T_r) \geq -11.59\,(eV)$$

$$(\mu_{Pb}^{2+})^0_{수용액}(T_r) + 8.97\,(eV) \geq (\mu_{I}^{-})^0_{수용액}(T_r) - 0.86\,(eV)$$

식 (4)−(6), (12), (13)을 우의 속박조건을 고려하여 풀 때 2제곱오차노름이 최소로 되는 풀이는 일정한 구간으로 주어지며 따라서 보다 많은 방정식들과 속박조건을 주어서 풀이구간을 줄여야 한다. 요드의 화학포텐샬최소값에 대한 속박조건을 0.7eV로부터 1.2eV까지 0.1eV 간격으로 변화시키면서 풀이를 구하고 2제곱오차가 최소(0.11)인 구간에서 풀이를 선택하였다.(그림)

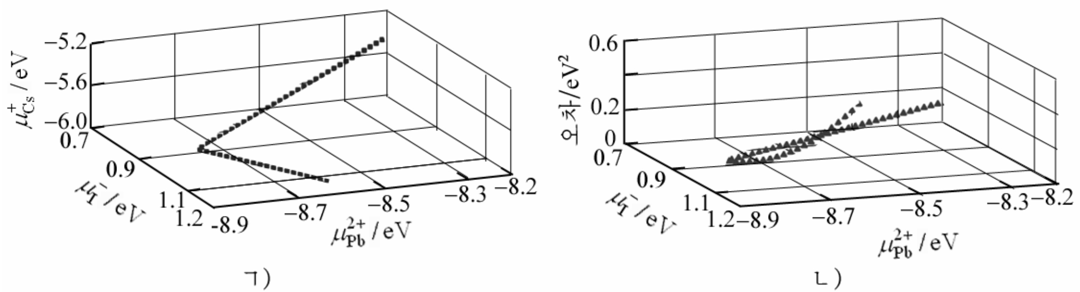


그림. 속박조건을 고려하여 최소2제곱법으로 구한 용매화된 이온들의 표준화학포텐샬(ㄱ))과 2제곱오차노름(ㄴ))

그 풀이들은 다음과 같다.

$$(\mu_{I}^{-})^0_{수용액}(T_r) = 0.93 \pm 0.07\,(eV)$$

$$(\mu_{Cs}^{+})^0_{수용액}(T_r) = -5.70 \mp 0.07(eV)$$

$$(\mu_{Pb}^{2+})^0_{수용액}(T_r) = -8.67 \mp 0.14(eV)$$

$$(\mu_{H}^{+})^0_{수용액}(T_r) = -5.74 \mp 0.07\,(eV)$$

맺 는 말

용액속에 해리되여있는 이온들의 화학포텐샬을 제1원리전에네르기값에 기초하여 정량적으로 평가하기 위한 방법을 제기하고 무기할로겐페로브스카이트형재료 $CsPbI_3$을 구성하는 이온들인 Cs^+, Pb^{2+}, I^-의 화학포텐샬을 평가하였다.

참 고 문 헌

[1] C. J. Yu et al.; J. Mater. Sci., 51, 9849, 2016.
[2] U. G. Jong et al.; Phys. Rev., B 98, 125116, 2018.
[3] Y. H. Kye et al.; J. Phys. Chem. Lett., 9, 2196, 2018.
[4] C. O'Brien et al.; J. Phys.: Condens. Matter, 25, 445008, 2013.

주체108(2019)년 6월 5일 원고접수

Determination of Chemical Potentials of Solvated Cs^+, Pb^{2+}, I^- Referenced to First Principles Calculations

Kye Yun Hyok, Yu Chol Jun

Estimating chemical potentials of ions dissociated in a solution with reference to the first principles calculation quantitatively is mandatory to reveal the defect physics of materials synthesized through the solution-based reaction. We investigated a way to calculate the chemical potentials of solvated ions (Cs^+, Pb^{2+}, I^-) which are used for the fabrication of inorganic perovskite $CsPbI_3$.

Key words: perovskite solar cell, chemical potential, first principles

김일성종합대학학보 물리학 | 주체108(2019)년 제65권 제4호

TiO_2분말의 탄화에 미치는 Ni촉매의 영향

방명일, 김청룡

TiC계경질합금과 금속사기절삭공구에서 TiC분말은 중요한 원료로 쓰인다.

TiO_2분말로부터 TiC분말을 제조하는데서는 매우 높은 온도(2 000～2 200℃)를 요구한다. TiC분말제조방법들중에서 TiO_2의 탄소환원법은 원료가 풍부하고 공정이 비교적 간단하며 제조시간이 상대적으로 짧고 원가가 적은 우점을 가지고있는것으로 하여 널리 쓰이고있다. 그러나 탄화온도가 높고 탄화시간이 오랜 결함이 있다.[3]

우리는 TiO_2분말로부터 TiC분말을 제조하는데서 Ni촉매가 탄화온도와 시간에 미치는 영향을 고찰하였다.

1. TiC분말제조방법

TiO_2을 원료로 하여 탄소환원법으로 TiC분말을 제조하는 방법에서는 보통 TiO_2(티탄백)과 아세틸렌흑의 혼합물을 전기로에서 고온탄화하여 TiC분말을 얻는다.[2]

고온에서 TiO_2분말이 아세틸렌흑에 의하여 환원되여 TiC분말이 생성되는 전체 반응식은 다음과 같다.



$$TiO_2 + 3C = TiC + 2CO\uparrow \quad (1)$$

이 반응과정은 세 단계로 나누어 진행된다. 즉



$$2TiO_2 + C = Ti_2O_3 + CO\uparrow \quad (2)$$



$$Ti_2O_3 + C = 2TiO + CO\uparrow \quad (3)$$



$$TiO + 2C = TiC + CO\uparrow \quad (4)$$

마지막단계의 반응에서 저가산화물인 TiO는 안정하기때문에 매우 높은 탄화온도가 필요하다.[3]

공업적으로는 TiO_2분말을 빠른 속도로 가열하고 랭각시켜 잘 탄화된 TiC를 얻는 방법으로 TiC분말의 결합탄소함량을 높인다.

2. TiC분말제조에서 Ti의 영향

출발원료로 99% TiO_2분말(3～5μm)과 아세틸렌흑(탄소함량 98%), 99% Ni분말을 리용하였다.

먼저 TiO_2분말과 아세틸렌흑분말의 배합비를 결정하였다.

탄소의 리론함량은 반응식 (1)에서 TiO_2과 3C의 분자량비에 의하여 결정된다.

$$W_C=(12.01\times3)/(79.9+12.01\times3)\times100=31.08(질량\%) \quad (5)$$

TiC분말에서 원료중 탄소함량에 따르는 전체 탄소와 유리탄소함량변화는 그림 1과 같다.

그림 1에서 보는바와 같이 탄소함량이 증가함에 따라 전체 탄소함량은 거의 선형적으로 증가한다. 탄소함량에 따르는 유리탄소함량의 변화를 보면 98%까지는 거의 변화가 없다가 그 이상부터는 급격히 증가한다. 원료중 탄소함량이 리론함량과 같을 때 유리탄소함량은 0.83%로서 요구되는 유리탄소함량인 0.5%보다 많다. 그것은 탄화과정에 흑연뽀드와 석영관 그리고 분위기가 모두 탄소를 증가시키는 작용을 하며 동시에 얻어지는 TiC에는 언제나 빈자리가 있어 탄소에 의하여 완전히 포화된 상태에 이를수 없기때문이다.[1]

따라서 실지 아세틸렌흑의 배합량을 리론탄소함량의 95～98%로 하였다. 즉 원료분말에서 TiO_2과 아세틸렌흑의 질량비는 2.3～2.5：1이다.

다음으로 Ni의 첨가가 TiO_2분말의 탄화온도에 미치는 영향을 고찰하였다. Ni를 첨가하지 않은 시료(시료 1)와 Ni를 0.5% 첨가한 시료(시료 2)에 대하여 1 850～1 900℃의 온도에서 그리고 수소분위기속에서 3h동안 탄화하였다.(그림 2)

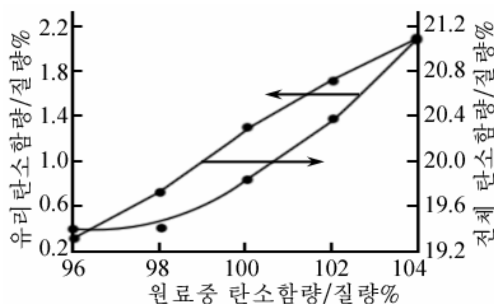


그림 1. TiC분말에서 원료중 탄소함량에 따르는 전체 탄소와 유리탄소함량변화

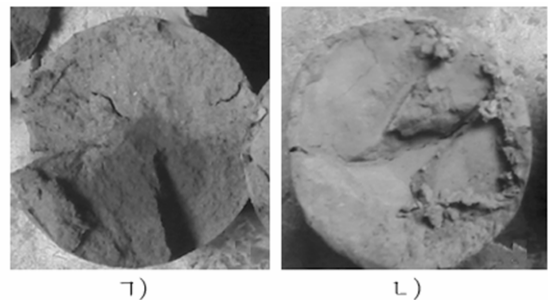


그림 2. Ni의 첨가가 탄화결과에 미치는 영향
ㄱ) Ni를 첨가하지 않은 시료, ㄴ) Ni를 0.5% 첨가한 시료

그림 2에서 보는바와 같이 시료 1에서는 탄화가 채 진행되지 못하여 중심부분에 검은색을 띠는 흑심이 남아있지만 시료 2에서는 중심부분까지 완전히 탄화되여 전부 회색을 띠고있다. Ni의 작용에 대하여 다음과 같이 해석할수 있다.

높은 온도에서 CO 혹은 탄화수소화합물기체는 완전히 분해되고 TiC의 형성과정은 주로 고상반응에 의거하여 진행된다. 탄화과정에 생기는 일산화탄소와 탄화수소화합물은 그리 높지 않은 온도에서 이미 탄소와 수소로 분해되며 분해된 탄소는 분산성이 매우 강한 아세틸렌흑립자우에 침적되여 아세틸렌흑의 흑연화를 일으키고 그것의 표면활성을 낮춘다. 이리하여 TiC의 생성반응속도를 낮추고 심한 경우에는 생성과정을 정지시키며 결국 반대방향의 반응이 진행되게 한다. Ni를 첨가하는 경우 Ni는 생성되는 TiC와 고용체를 형성하고 이 고용체는 아세틸렌흑의 흑연화를 방해하며 결과 탄화의 거꿀반응이 일어나지 못하도록 한다. 따라서 1 850～1 900℃의 낮은 온도에서도 탄화속도가 빨라져 생성물에 흑심이 존재하지 않는다.

다음으로 Ni의 첨가가 TiO_2분말의 탄화시간에 미치는 영향을 고찰하였다.

Ni를 0.5% 첨가한 시료에 대하여 1 850～1 900℃의 온도에서 각각 2, 2.5, 3h동안 탄화를 진행하였다. 탄화는 표면으로부터 시작하여 점차 내부로 진행되는데 이때 탄화과정에서 다음과 같은 공통적인 특징을 찾아볼수 있다.

우선 탄화초기에 TiO_2과 아세틸렌흑+촉매로 이루어진 표면이 검은색으로부터 회색으로 변하며 탄화시간이 증가하는데 따라 TiC로 탄화된 회색의 겉면층두께는 증가하고 내부로 들어가면서 얇은 층의 연한 검은색이 존재하며 중심은 전부 검은색의 TiO와 C로 이루어져있다.(그림 3) 뽀드의 크기가 ϕ50mm×ϕ200mm일 때 중심까지 완전히 탄화되는 시간(흑심이 없어지는 시간)은 3h이였다.

따라서 질이 좋은 TiC분말을 얻기 위해서는 탄화시간을 3h정도로 하여야 한다.

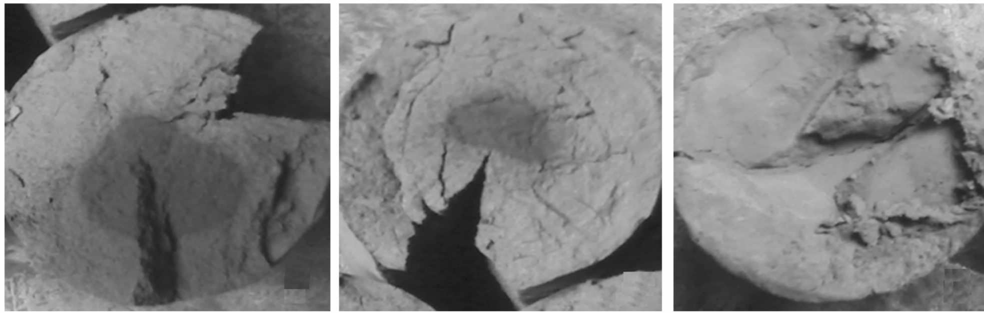


그림 3. 탄화시간이 탄화결과에 미치는 영향

ㄱ) 2h, ㄴ) 2.5h, ㄷ) 3h

3h동안 탄화한 시료에 대하여 X선상분석(그림 4)과 립도분석을 진행하였다.

그림 4에서 보는바와 같이 TiC에 해당한 봉우리들만이 존재하고 반응물인 산화물들의 회절봉우리는 나타나지 않았다. C는 무정형상태의 분말이므로 탄화생성물에 존재한다고 하여도 XRD도형에는 나타나지 않는다. TiC분말의 평균립도는 1μm이하였다.

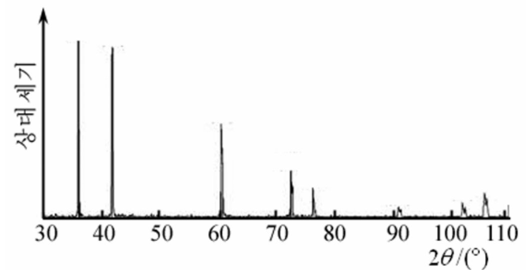


그림 4. 3h동안 탄화한 TiC분말의 XRD도형

맺 는 말

TiO_2분말로부터 TiC분말을 제조하는데서 Ni는 탄화온도와 시간에 큰 영향을 준다.

Ni를 0.5% 첨가한 시료를 수소분위기속에서 1 850～1 900℃, 3h동안 탄화하면 질좋은 TiC분말을 얻을수 있다.

참 고 문 헌

[1] 김청룡 등; 금속, 1, 27, 주체106(2017).

[2] D. Y. Dang et al.; J. Appl. Phys., 116, 1, 2014.

[3] 张辅魁; CN201310217111.3, 2013.

주체108(2019)년 6월 5일 원고접수

The Effect of Ni Catalyst on Carbonization of TiO_2 Powder

Pang Myong Il, Kim Chong Ryong

We considered the effect of Ni on carbonization temperature and time in preparing TiC powder from TiO_2 powder. In order to obtain high quality TiC powder, it needs to be carbonized for 3hours in temperature of 1 850~1 900℃ under hydrogen atmosphere.

Key words: TiO_2 powder, TiC powder, carbonization, Ni

용액연소합성법에 의한 ZnO나노분말제조의 열력학적특성

김현성, 류정애

경애하는 최고령도자 **김정은**동지께서는 다음과 같이 말씀하시였다.

《정보기술, 나노기술, 생물공학을 비롯한 핵심기초기술과 새 재료기술, 새 에네르기기술, 우주기술, 핵기술과 같은 중심적이고 견인력이 강한 과학기술분야를 주타격방향으로 정하고 힘을 집중하여야 합니다.》

재료합성방법들가운데서 우수하다고 볼수 있는 연소합성(SHS: self-propagating high-temperature synthesis)법은 공정이 간단하고 빠르며 경제적이지만 고상반응인것으로 하여 상순도와 립자크기조절이 힘들고 나노결정재료제작에 불합리한 결함들을 가지고있다.[1] 최근에 연소합성이 저온에서 진행되는것으로 하여 SHS방법의 결점이 극복되였다고 볼수 있는 용액연소합성(SCS: solution combustion synthesis)법이 개발되여 광범히 리용되고 있다.[2]

우리는 용액연소합성법으로 ZnO나노분말을 제조하기 위한 열력학적과정을 고찰하고 ZnO나노분말제조를 위한 화학량론비와 불길온도를 결정하였다.

용액연소합성법에 의한 ZnO나노분말제조에 리용되는 여러 재료들의 열력학적특성량들을 표에 보여주었다.

표. 용액연소합성법에 의한 ZnO나노분말제조에 리용되는 여러 재료들의 열력학적특성량

화합물	ΔH /(kcal·mol^{-1})	C_p /(cal·mol^{-1}·K^{-1})
$Zn(NO_3)_2 6H_2O$	−551.386	53.298
$C_6H_8O_7$(고체)	−332.139	44.325+69.959T
ZnO(고체)	−83.772	11.373+0.000 933T
CO_2(기체)	−94.05	7.006+0.009 553T
H_2O(기체)	−57.798	6.790+0.002 980T
N_2(기체)	0	7.002−0.000 375T

표에서 ΔH는 해당 화합물의 생성엔탈피이며 C_p는 등압열용량이다. C_p는 온도의 함수로서 일반적으로 다음과 같이 표시된다.

$$C_p = A + B\times10^{-3}T + C\times10^{-5}T^2 + D\times10^{-6}T^3$$

그러나 SCS의 경우에 단열불길온도가 그리 높지 않으므로 $C\times10^{-5}T^2$, $D\times10^{-6}T^3$항을 무시하고 $C_p \approx A + B\times10^{-3}T$로 근사시킬수 있다.

SCS법에 의한 산화물재료의 합성에서는 원료로 금속의 질산염을, 연료로 레몬산, 글리신, 뇨소 등을 리용한다. 원료와 연료를 물에 풀고 미리 가열된 마플로에 넣으면 처음에 물이 끓으면서 증발하고 다음 혼합물이 거품상태로 넘어가며 나중에는 점화되여 전체가 강한 화염을 내면서 불탄다. 이러한 과정의 결과 매우 미세한 분말로 이루어진 큰 체

적의 생성물이 생긴다.

산화제와 연료혼합물의 당량비는 원소화학량론결수에 의하여 표시된다.

$$\Phi_e = \frac{n\sum(\text{화학량론식에 있는 환원성원소들의 결수})\times(\text{원자가})}{(-1)a\sum(\text{화학량론식에 있는 산화성원소들의 결수})\times(\text{원자가})} \quad (1)$$

$\Phi_e = 1$일 때 혼합물은 화학량론조성을 가진다고 하며 이때 화학량론조성화합물은 최대에네르기를 생성한다. $\Phi_e > 1$일 때에는 연료풍부, $\Phi_e < 1$일 때에는 연료부족이라고 한다.

화학량론조성혼합물($\Phi_e = 1$)에 요구되는 연료와 산화제의 물질량비(F/O)는 산화제복합물에 있는 전체 산화 및 환원원자가들을 합하고 그것을 연료혼합물에 있는 전체 산화 및 환원원자가들의 합으로 나누어 결정한다. 이러한 형태의 계산에서 산소만이 산화성원소이며 탄소, 수소, 금속양이온들은 환원성원소, 질소는 중성이다. 산화성원소들은 정의 원자가를 가지며 환원성원소들은 부의 원자가를 가진다.

용액연소계산에서는 산화성원소들의 원자가를 부수값으로 고찰하며 환원성원소들은 정수값으로 고찰한다. 이에 따라 C, Zn, H원소들의 원자가들은 각각 +4, +2, +1이며 산소의 산화성원자가는 －2로 주어진다. 질소의 원자가는 령으로 한다.

질산아연의 산화성원자가와 레몬산의 환원성원자가는 다음과 같이 계산된다.

$$Zn(NO_3)_2 = -10;\ [Zn = +2,\ 2N = 0,\ \ 6O = (6\times(-2)) = -12]$$

$$C_6H_8O_7 = +18;\ [6C = +24,\ 8H = (8\times(+1)) = +8,\ 7O = (7\times(-2)) = -14]$$

따라서 질산아연과 레몬산혼합물이 완전히 연소되는 경우 물질량비는 $10/18 \approx 0.55$로 된다. 즉 질산아연과 레몬산의 반응은 $1:0.55$의 물질량비로 진행될 때 방출되는 에네르기가 최대이며 탄소잔류물이 없이 연소가 완료된다.

결과 산화아연나노립자를 합성하기 위한 산화환원반응방정식은



$$9Zn(NO_3)_2\cdot 6H_2O + 5C_6H_8O_7 = 9ZnO + 30CO_2 + 74H_2O + 9N_2 \quad (2)$$

로 표시되며 이때 화학량론조성화합물은 최대에네르기를 생성한다.

용액연소반응에서는 매우 짧은 시간동안에 1 000℃ 이상의 매우 높은 온도에 도달된다. 열이 주위로 퍼져나가는 시간이 매우 짧으므로 열적으로는 단열계로 가정할수 있으며 그 결과 생성물이 도달하게 되는 최대온도를 단열온도로 볼수 있다. 반응에서 유리되는 열은 계의 엔탈피변화량이며 이것은 상태함수이다.

엔탈피는 다음과 같이 표시된다.

$$\Delta H^0 = \Delta H_f^0 = \int_{298}^{T_{ad}} nC_p(\text{생성물})dT \quad (3)$$

여기서 적분은 생성물들의 정압열용량과 몰수의 적의 합을 의미하는데 이것은 일반적으로 온도의 함수이다. T_{ad}는 연소불길의 온도를 의미하며 298은 방온도 25℃에 대응한 절대온도를 나타낸다. 질산아연과 레몬산혼합물로부터 산화아연의 연소합성에서 유리되는 열은 표준상태에서 반응물과 생성물의 ΔH_f^0값(kcal/mol)을 단위로 하는 생성열을 리용하여 계산할수 있다.

반응물: $Zn(NO_3)_2 = -551.386,\ C_6H_8O_7 = -332.139$

생성물: $ZnO = -83.772,\ CO_2 = -94.05,\ H_2O(\text{물}) = -57.798$

$$\Delta H_f^0(\text{반응물}) = \Delta H_f^0(Zn(NO_3)_2)\cdot 6H_2O + \Delta H_f^0(C_6H_8O_7) =$$
$$= 9\times(-551.386) + 5\times(-332.139) = -6\ 623.169\text{kcal/mol}$$
$$\Delta H_f^0(\text{생성물}) = \Delta H_f^0(ZnO) + \Delta H_f^0(CO_2) + \Delta H_f^0(N_2) + \Delta H_f^0(H_2O) =$$
$$= 9\times(-83.772) + 30\times(-94.05) + 74\times(-57.798) + 9\times 0 =$$
$$= -7\ 852.5\text{kcal/mol}$$
$$\Delta H_f^0(\text{반응}) = \Delta H_f^0(\text{생성물}) - \Delta H_f^0(\text{반응물}) = -1\ 229.331\text{kcal/mol}$$
$$\int_{298}^{T_{ad}} nC_p(\text{생성물})dT = 0.255\ 84t_{ad}^2 + 878.015t - 284\ 368.085\ 4(\text{cal/mol}\cdot\text{K})$$

따라서 $0.255\ 84t_{ad}^2 + 878.015t - 284\ 368.085\ 4 = 1\ 229.331\cdot 10^3$ 이다.

우의 방정식을 풀면 $T_f \approx 1\ 660.8\text{K}$ 이다. 즉 질산아연을 산화제로 하고 레몬산을 연료로 하는 용액연소법에 의한 ZnO나노립자의 연소반응불길온도는 약 1 387.6°C 정도이다.

맺 는 말

질산아연과 레몬산을 연료로 하는 나노산화아연의 합성을 위한 열력학적과정을 분석하고 화학량론조성혼합물($\Phi_e = 1$)에 요구되는 산화제와 연료의 물질량비(O/F)가 질산아연과 레몬산의 연소반응의 경우에 0.55, 불길온도는 대략 1 388°C 라는 해석결과를 얻었으며 그 결과를 실험을 통하여 확증하였다.

참 고 문 헌

[1] K. C. Patil et al.; Chemistry of Nanocrystalline Oxide Materials, World Scientific, 42～61, 2011.

[2] D. S. Bai et al.; Indian Journal of Advances in Chemical Science, 5, 3, 137, 2017.

주체108(2019)년 6월 5일 원고접수

Thermodynamic Characteristics of Preparation of ZnO Nanopowder by Solution Combustion Synthesis Method

Kim Hyon Song, Ryu Jong Ae

We considered the thermodynamic processes for the preparation of ZnO nanopowder made from zinc nitrate and citric acid and found the O/F(Oxidizer/Fuel) ratio and flame temperature required at stoichiometric impurity.

Key words: zinc oxide, nanopowder, oxidizer, fuel

볼트조임형압전진동자의 압전특성에 미치는 1축압력의 영향

주광호, 차경철

위대한 령도자 **김정일**동지께서는 다음과 같이 교시하시였다.

《과학자, 기술자들은 현실에 튼튼히 발을 붙이고 사회주의건설의 실천이 제기하는 문제들을 연구대상으로 삼고 과학연구사업을 진행하여야 하며 연구성과를 생산에 도입하는데서 나서는 과학기술적문제들을 책임적으로 풀어야 합니다.》(《**김정일**선집》 증보판 제15권 492페지)

선행연구[1]에서는 볼트조임형압전진동자의 제작조건에 따르는 압전특성의 변화를 고찰하였다.

론문에서는 볼트조임형압전진동자의 특성에 미치는 1축압력의 영향을 고찰하였다.

먼저 $K_p = 0.74$, $\varepsilon = 2\ 500$ 인 PZT합성분말로 $\Phi_{외} = 12\text{mm}$, $\Phi_{내} = 4.5\text{mm}$, $h = 6.0\text{mm}$ 인 고리형압전시편들을 만든 다음 금속편들과 압전시편들을 결합하여 50kHz 볼트조임형압전진동자를 제작하였다.[1]

1축압력에 따르는 특성변화를 고찰하기 위하여 압력을 받을 량면에 2mm 두께의 코르크판을 대고 프레스의 압력을 변화시키면서 직시장치(《LSW-115》)와 결합된 공진－반공진측정회로에서 공진 및 반공진주파수와 공진저항을 측정하였다.

유효전기력학결합결수는 다음식으로 결정하였다.

$$K_{유효} = \sqrt{1-(f_r / f_a)^2}$$

여기서 f_r 는 공진주파수, f_a 는 반공진주파수이다.

1축압력에 따르는 공진주파수의 변화는 그림 1과 같다.

그림 1에서 보는바와 같이 볼트조임형압전진동자의 공진주파수는 압력에 따라 리력특성을 나타낸다. 특히 5MPa까지 압력순환의 감소단계에서 공진주파수는 1축압력이 완전히 해소되기 전까지 거의나 일정한 값으로 유지된다.(곡선 1) 이러한 특성은 압력순환을 반복할 때(곡선 2)에도 거의나 류사하게 나타났다. 공진주파수가 압력에 따라 리력특성을 가지는것은 압전사기재료가 완전림성체가 아니기때문이다. 압전사기재료가 완전림성체가 아닐 때 변형은 압력에 따라 리력특성을 가지게 되며 따라서 공진주파수 역시 리력특성을 나타내는것으로 해석할수 있다. 곡선 3에서 보는바와 같이 압력을 10MPa까지 증가시킬 때 압력증가에 따르는 공진주파수변화특성은 곡선 1,

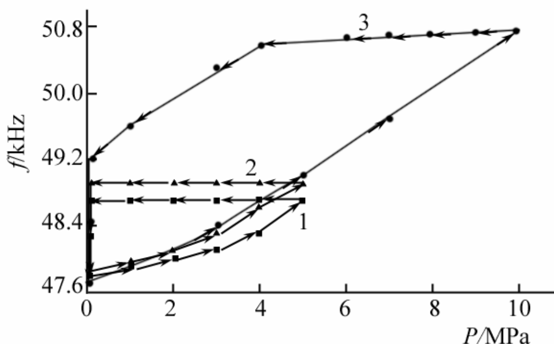


그림 1. 1축압력에 따르는 공진주파수의 변화
1, 3은 압력을 각각 5, 10MPa까지 순환시키면서 측정한 곡선, 2는 압력을 5MPa까지 반복순환시키면서 측정한 곡선

2와 류사하지만 감소단계에서는 차이난다. 이것은 보다 높은 압력에서는 휨성적작용이 보다 강화된다는것을 의미한다.

1축압력에 따르는 유효전기력학결합결수의 변화는 그림 2와 같다.

그림 2에서 보는바와 같이 유효전기력학결합결수는 1축압력의 증가에 따라 10MPa까지는 거의나 변화되지 않으며 오히려 약간 증가되였다가 약간 감소되였다. 이것은 랑쥬뱅형복합진동자의 특성이 압전요소의 특성과 함께 요소들의 밀착상태와도 관계되기때문이다. 일반적으로 압전시편이 분극될 때 분극방향으로 늘음변형이 나타나게 되며 늘음변형이 클수록 압전특성은 높다. 압전시편의 분극방향으로 1축압력을 주면 늘음변형은 작아지게 되며 압전특성은 저하된다. 랑쥬뱅형복합진동자의 특성이 일정한 압력에서 약간 증가경향을 나타내는것은 요소들사이의 밀착상태가 개선되는 효과로 해석할수 있다.

1축압력에 따르는 공진저항의 변화는 그림 3과 같다.

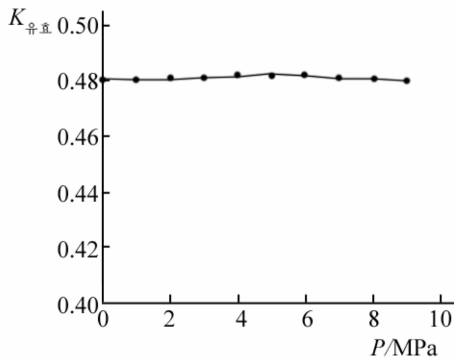


그림 2. 1축압력에 따르는 유효전기력학결합결수의 변화

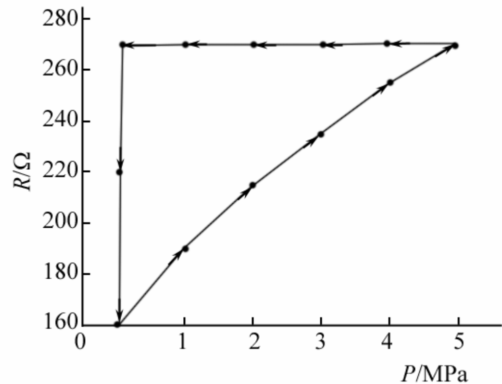


그림 3. 1축압력에 따르는 공진저항의 변화

그림 3에서 보는바와 같이 공진저항 역시 1축압력에 따라 리력특성을 가진다.

1축압력이 작용할 때 교류전기마당에 따르는 도멘의 회전은 보충적인 내부응력의 작용으로 억제되며 따라서 공진저항은 증가하게 된다. 1축압력이 감소할 때 공진저항의 변화가 리력특성을 나타내는것은 압전사기재료의 비휨성적성질에 의하여 잔류변형이 존재하기때문이다.[2]

맺 는 말

1축압력이 작용할 때 볼트조임형압전진동자의 공진주파수, 유효전기력학결합결수, 공진저항은 리력특성을 가진다. 리력특성의 기본원인은 압전사기재료의 비휨성적성질에 기인된다.

참 고 문 헌

[1] **김일성**종합대학학보 물리학, 64, 2, 17, 주체107(2018).

[2] 水野 衛; 塑性と加工, 55, 266, 2011.

주체108(2019)년 6월 5일 원고접수

The Influence of Unity Axis Pressure on the Character of Bolt Clamp Type Piezoelectric Vibrator

Ju Kwang Ho, Cha Kyong Chol

We experimentally found that the character of bolt clamp type piezoelectric vibrator exhibited hysteresis with unity axis pressure and explained the cause on the unelastic property.

Key words: bolt clamp type piezoelectric vibrator, unity axis pressure, hysteresis

김일성종합대학학보 주체108(2019)년
물리학 제65권 제4호

비자화플라즈마매질속으로 전파되는 전자기파의 감쇠특성

한영수, 최은화

경애하는 최고령도자 **김정은**동지께서는 다음과 같이 말씀하시였다.

《수학, 물리학, 화학, 생물학과 같은 기초과학부문에서 과학기술발전의 원리적, 방법론적기초를 다져나가면서 세계적인 연구성과들을 내놓아야 합니다.》

최근에 플라즈마와 같은 분산매질에서 전자기파의 전파특성에 대한 해석이 많이 진행되였다.[1]

우리는 플라즈마전자밀도가 포물선분포를 가지는 경우에 불균일한 비자화플라즈마구역에서 가로전자기파의 감쇠특성을 연구하였다.

1. 고주파려파기로서의 비자화플라즈마매질에 대한 조건

플라즈마는 일반적으로 고주파려파기능을 가진다.[4] 불균일한 비자화플라즈마매질속에서 전자기파의 전파는 주로 플라즈마의 굴절률에 의하여 결정되며 플라즈마의 굴절률은 그것의 전자밀도에 관계된다. 입사전자기파의 흡수를 크게 하면서 반사를 될수록 작게 하기 위하여서는 플라즈마매질에서 자유전자밀도가 다음의 조건을 만족시켜야 한다.

① 플라즈마매질속에서 자유전자밀도가 불균일하여야 한다.

② 플라즈마의 반사결수가 련속이고 령보다 큰 실수여야 한다.

③ 플라즈마의 굴절률과 그 도함수가 련속이여야 한다.

불균일플라즈마층에서 전자기파의 전파를 그림 1에 보여주었다. 유한한 두께를 가진 플라즈마구역을 일정한 폭을 가진 n개의 층들로 나누고 외부자기마당 $\boldsymbol{B}$는 x축에 평행으로 입사한다고 하자. 입사구역(0)과 투과구역(p)은 자유공간이며 z방향으로 편극된 평면전자기파가 플라즈마매질에 수직으로 입사한다.

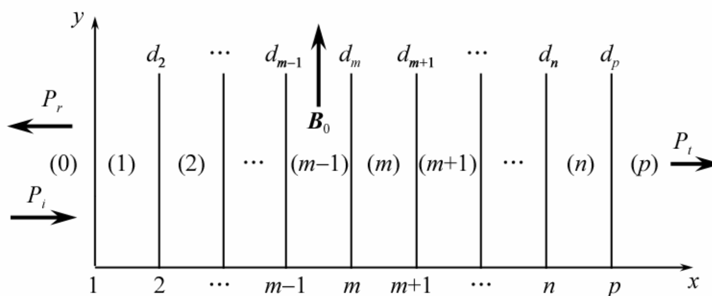


그림 1. 플라즈마층에서 전자기파의 전파

이때 전자밀도는 x의 함수로서 다음과 같은 포물선분포를 가진다.

$$N_e=\begin{cases} N_0\left(1-\dfrac{(2x-d)^2}{d^2}\right), & x\le\dfrac{d}{2} \\ N_0\left(1-\dfrac{(d-2x)^2}{d^2}\right), & x>\dfrac{d}{2} \end{cases} \tag{1}$$

여기서 N_0은 플라즈마의 최대전자밀도, d는 플라즈마구역의 두께이다.

비자화플라즈마의 유전률 ε_r 는 다음과 같이 표시된다.[3]

$$\varepsilon_r=n^2=1-\frac{\omega_{pm}^2}{\omega_0^2+\nu^2}-j\frac{\nu}{\omega_0}\frac{\omega_{pm}^2}{\omega_0^2+\nu^2} \tag{2}$$

여기서 n 은 플라즈마매질의 굴절률, $\omega_0=2\pi f_0$ 은 입사전자기파의 각주파수, ν 는 충돌주파수이다. ω_{pm} 은 m번째 층의 플라즈마주파수로서 다음과 같다.

$$\omega_{pm}^2=e^2\frac{N_e^{(m)}}{m\varepsilon_0} \tag{3}$$

2. 비자화플라즈마매질속으로 수직입사하는 전자기파의 감쇠특성

입사구역에서 입사마당 E_z^i 와 반사마당 E_z^s 는 다음과 같다.

$$E_z^i=E_0e^{-i\tilde{k}_x^{(0)}x},\quad E_z^s=E_0R\,e^{i\tilde{k}_x^{(0)}x}$$

여기서 R는 결정하여야 할 결수이고 $\tilde{k}_x^{(0)}$ 은 자유공간에서 파수의 x성분이다.

입사구역에서 총마당은 다음과 같다.

$$E=E_0(e^{-i\tilde{k}_x^{(0)}x}+R\,e^{i\tilde{k}_x^{(0)}x}) \tag{4}$$

m번째 플라즈마층에서 총전기마당은 반사와 입사성분의 합으로서 다음과 같이 표시된다.

$$E_z^{(m)}=E_0(B_me^{-i\tilde{k}_x^{(m)}x}+C_m\,e^{i\tilde{k}_x^{(m)}x}) \tag{5}$$

마지막구역에서는 투과파만이 있으므로 전기마당은 다음과 같다.

$$E_z^{(p)}=TE_0e^{-i\tilde{k}_x^{(p)}x} \tag{6}$$

x=0에서 경계조건을 만족시키자면 다음의 행렬방정식이 만족되여야 한다.

$$\begin{pmatrix}B_1\\C_1\end{pmatrix}=S_1\begin{pmatrix}R\\1\end{pmatrix}$$

$$S_1=\frac{1}{2\tilde{k}_x^{(1)}}\begin{pmatrix}\tilde{k}_x^{(1)}-\tilde{k}_x^{(0)} & \tilde{k}_x^{(1)}+\tilde{k}_x^{(0)}\\ \tilde{k}_x^{(1)}+\tilde{k}_x^{(0)} & \tilde{k}_x^{(1)}-\tilde{k}_x^{(0)}\end{pmatrix} \tag{7}$$

m번째 경계면에서 경계조건을 고려하면 다음과 같다.

$$\begin{pmatrix}B_m\\Cm\end{pmatrix}=S_m\begin{pmatrix}B_{m-1}\\C_{m-1}\end{pmatrix} \tag{8}$$

여기서 S_m 은 m번째 경계면의 산란행렬이다. 즉

$$S_m = \begin{pmatrix} e^{-i\tilde{k}_x^{(m)}d_m} & e^{i\tilde{k}_x^{(m)}d_m} \\ \tilde{k}_x^{(m)}e^{-i\tilde{k}_x^{(m)}d_m} & -\tilde{k}_x^{(m)}e^{i\tilde{k}_x^{(m)}d_m} \end{pmatrix}^{-1} \begin{pmatrix} e^{-i\tilde{k}_x^{(m-1)}d_m} & e^{i\tilde{k}_x^{(m-1)}d_m} \\ \tilde{k}_x^{(m-1)}e^{-i\tilde{k}_x^{(m-1)}d_m} & -\tilde{k}_x^{(m-1)}e^{i\tilde{k}_x^{(m-1)}d_m} \end{pmatrix}$$

이다. $x = d_p$ 에서 경계조건을 리용하면 식 (8)은 다음과 같이 표시된다.

$$\begin{pmatrix} B_n \\ C_n \end{pmatrix} = V_p T \tag{9}$$

$$V_p = \frac{1}{2\tilde{k}_x^{(n)}} \begin{pmatrix} \tilde{k}_x^{(n)} + \tilde{k}_x^{(p)} e^{i(\tilde{k}_x^{(n)} + \tilde{k}_x^{(p)})d_p} \\ \tilde{k}_x^{(n)} - \tilde{k}_x^{(p)} e^{-i(\tilde{k}_x^{(n)} + \tilde{k}_x^{(p)})d_p} \end{pmatrix} \tag{10}$$

식 (9)를 일반화하면 다음과 같다.

$$S_g \begin{pmatrix} R \\ 1 \end{pmatrix} = V_p \cdot T \tag{11}$$

여기서 S_g 는 대역산란행렬이다.

$$S_g = \left(\prod_{m=n}^{2} S_m \right) S_1 \tag{12}$$

$S_g = (S_{g1},\ S_{g2})$ 로 표시하면 식 (11)은 다음과 같이 변환된다.

$$\begin{pmatrix} R \\ T \end{pmatrix} = -(S_{g1} - V_p)^{-1} \cdot S_{g2} \tag{13}$$

이 결과는 반무한균일플라즈마인 경우의 결과[2]와 일치한다. 따라서 R와 T는 총반사결수와 총투과결수라는것을 알수 있다.

플라즈마매질로 전파되는 전자기파의 감쇠률은 다음과 같이 계산된다.

$$A = -20\lg T \tag{14}$$

불균일플라즈마구역을 50개의 층으로 나누고 매층에서 전자밀도는 고정시키고 충돌주파수에 따르는 전자기파의 감쇠률을 고찰하였다.(그림 2) 이때 $N_0 = 1\times10^{17}\,\mathrm{m}^{-3}$ 이며 d=15cm이다.

그림 2에서 보는바와 같이 플라즈마매질속에서 전자기파의 감쇠률은 충돌주파수가 입사주파수의 근방에 놓일 때 최대값에 도달한다. 그것은 전자기파의 주파수가 충돌주파수부근의 비교적 낮은 주파수에 있을 때 플라즈마가 강한 공명흡수를 일으켜 투과결수가 크게 감소되기때문이다.

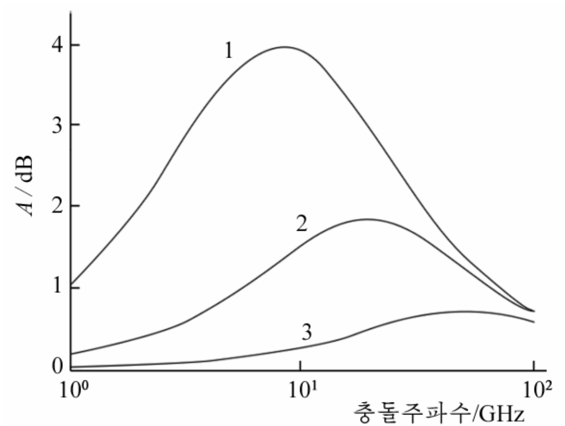


그림 2. 충돌주파수에 따르는 감쇠률
1－3은 f_0 이 각각 10, 20, 50GHz 인 경우

또한 입사전자기파의 주파수가 클 때 플라즈마의 상대유전률이 1로 다가가면서 흡수가 거의 일어나지 않기때문에 감쇠률은 작아진다.

맺 는 말

불균일한 비자화플라즈마매질속으로 입사하는 전자기파의 흡수는 입사전자기파의 주파수에 따라 변하며 충돌주파수가 입사주파수근방에 놓일 때 최대로 된다.

참 고 문 헌

[1] B. W. Bai et al.; IEEE Trans. Antennas Propag., 42, 3365, 2014.
[2] W. C. Chew; Waves and Fields in Inhomogeneous Media, Van Nostrand Reinhold, 45～53, 1990.
[3] A. Piel; Plasma Physics, Springer, 143～148, 2010.
[4] 刘少斌 等; 电波科学学报, 18, 1, 25, 2003.

주체108(2019)년 6월 5일 원고접수

On Attenuation of EM Wave in Unmagnetized Plasma Medium

Han Yong Su, Choe Un Hwa

We studied the collision absorption to frequency of EM wave when EM wave is incident into unmagnetized inhomogeneous plasma medium.

Key words: unmagnetized plasma, attenuation

김일성종합대학학보 주체108(2019)년
물리학 제65권 제4호

40K급축랭기의 설계최량화를 위한 수값모의연구

한정애, 김광선, 김영환

스터링랭동기, GM랭동기, 팔스관랭동기와 같이 기체랭동순환을 리용하는 극저온랭동기들에서 축랭기는 가장 중요한 구성요소로서 랭동기의 랭동성능에 결정적인 영향을 미친다. 이로부터 축랭기를 최량설계하는것은 성능결수가 높은 극저온랭동기를 개발하기 위하여 선차적으로 제기되는 매우 중요한 문제이다.

선행연구[1－3]에서는 REGEN, Sage, Fluent 등 여러가지 응용프로그람들을 리용하여 팔스관랭동기에 대한 수값모의연구는 진행하였지만 압축기출력이 정해진 조건에서 축랭기를 최량설계하는 구체적인 방법론에 대해서는 거의나 소개된것이 없다.

론문에서는 REGEN 3.3을 리용하여 입구전력이 1kW정도로 작은 압축기에 의해 구동하는 GM형팔스관랭동기의 40K급축랭기를 최량설계하고 그 성능을 평가하기 위한 수값모의연구를 진행하였다.

1. 축랭기의 수값계산을 위한 리론적모형

축랭기에서는 작업기체인 헬리움의 주기적인 진동흐름이 존재하며 축랭재와 작업기체사이에 열교환이 부단히 진행된다. 축랭기에서 진행되는 물리적과정을 표시하는 기본방정식은 질량보존방정식과 운동량보존방정식, 에네르기보존방정식으로 구성된다. 즉

$$\frac{\partial \rho}{\partial t}+\frac{\partial(\rho v)}{\partial x}=0 \tag{1}$$

$$\frac{\partial(\rho v)}{\partial t}+\frac{\partial(\rho v^2+p)}{\partial x}=0 \tag{2}$$

$$\frac{\partial e}{\partial t}+\frac{\partial((e+p)v)}{\partial x}=0 \tag{3}$$

축랭기모의 및 설계프로그람인 REGEN 3.3으로는 계차법과 몇가지 경험적관계식들을 결합하여 방정식 (1)－(3)을 수값적으로 푼다. 축랭기에서 헬리움기체의 압력과 질량흐름속도의 시간에 따르는 변화는 시누스적이라고 보며 방정식계에서의 비선형성을 피하고 계산을 간단히 하기 위해 반경험적방법을 리용하여 방정식계를 최종적으로 다음과 같은 형태로 변형한다.

$$\frac{\partial}{\partial x}\left(\rho c^2\frac{\partial v}{\partial x}\right)-\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{4G_rH(p, T, v)}{D_h}(T_m-T)-G_rk_g\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}\right]=0 \tag{4}$$

$$\frac{\partial p}{\partial t}+\rho c^2\frac{\partial v}{\partial x}-\frac{4G_rH(p, T, v)}{D_h}(T_m-T)-G_rk_g\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}=0 \tag{5}$$

$$\frac{\partial T}{\partial t}+v\frac{\partial T}{\partial x}+G_rT\frac{\partial v}{\partial x}-\frac{4H(p, T, v)}{\rho c_v D_h}(T_m-T)-\frac{k_g}{\rho c_v}\frac{\partial^2 T}{\partial x^2}=0 \tag{6}$$

$$\frac{\partial T_m}{\partial t}+\frac{4\phi H(p,T,v)}{(1-\phi)c_m D_h}(T_m-T)-\frac{1}{c_m}\frac{\partial(k_m\partial T_m/\partial x)}{\partial x}=0 \tag{7}$$

이상의 기본방정식계를 풀기 위해 요구되는 기본적인 입력파라메터들은 운전주파수, 평균압력, 축랭재(재료, 기공률, 선직경 또는 수력직경), 축랭기의 기하학적크기이다. 이와 함께 경계조건으로는 축랭기의 고온단 및 저온단온도, 저온단에서 헬리움기체의 압력과 질량흐름속도사이의 위상차, 평균압력과 압력비, 질량흐름속도가 있다.

2. 모의계산결과 및 분석

압축기의 출력에 맞게 GM형팔스관랭동기의 축랭기를 최량설계하자면 입력파라메터들을 합리적으로 설정하는것이 중요한데 그것은 대표적으로 운전주파수와 압력비, 저온단온도이다. 현재까지 액체헬리움온도급 GM형팔스관랭동기를 구동하는 헬리움압축기의 입구전력은 1.7~11kW의 범위에 있다. 변구동형압축계통에 의해 구동되는 GM형팔스관랭동기의 운전주파수는 대체로 1~2Hz로서 비교적 낮다. 이때 압력비는 1.5이상이며 예랭온도는 40K으로부터 60K사이에 있다. 입구전력이 1kW정도로서 매우 작은 압축기로 구동하는 기체결합형2단팔스관랭동기의 경우에 1단축랭기에서의 최대압력비는 1.5로, 예랭온도는 량단이음에서 음향학적일의 분배특성을 고려하여 40K으로 정하는것이 타당하다.

변구동형헬리움압축기의 출구에서 헬리움의 압축, 팽창과정을 단열과정으로 볼 때 다음의 관계식을 리용하여 축랭기입구에서의 질량흐름속도를 평가할수 있다.

$$P\dot{V}_{입}=\dot{W}_e\eta=\dot{m}_{입}\frac{\gamma}{\gamma-1}RT_{입}\left[\left(\frac{P_{출}}{P_{입}}\right)^{\frac{\gamma-1}{\gamma}}-1\right] \tag{8}$$

그림 1에 압축기의 입구전력이 1~1.3kW정도인 경우에 평균압력을 파라메터로 하여 압축기출구에서의 압력차에 따르는 헬리움기체의 질량흐름속도의 계산결과를 보여주었다.

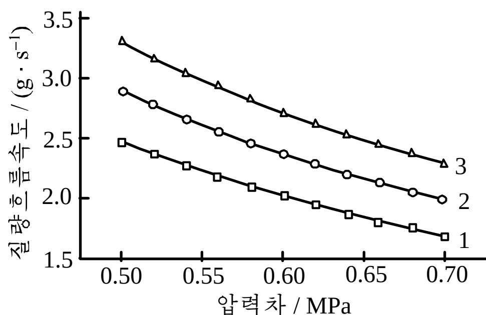


그림 1. 압축기출구에서의 압력차에 따르는 헬리움기체의 질량흐름속도

1—3은 평균압력이 각각 1.3, 1.5, 1.7MPa인 경우

그림을 통하여 축랭기입구(즉 축랭기고온단)에서의 질량흐름속도의 변화범위를 2~3g/s로 정하는것이 타당하다는것을 알수 있다.

REGEN에 의한 축랭기의 수값모의계산에서는 엔탈피흐름, 음향학적일, 랭각능력 등 여러가지 결과들이 얻어지는데 축랭기의 성능결수 COP를 기본목적량으로 하였다. 축랭재로는 1단축랭기에서 대표적으로 많이 리용하는 기공률이 0.686, 수력직경이 88.7μm 인 250목불수강금망을 선정하였다. 저온단의 위상은 0°로 설정하였다.

우선 운전주파수를 파라메터로 하고 축랭기의 길이와 자름면적에 따르는 COP를 모의계산하였다. 그림 2에서 보여준것처럼 각이한 주파수에 해당한 최대COP는 1.2Hz이상에서 감소한다.

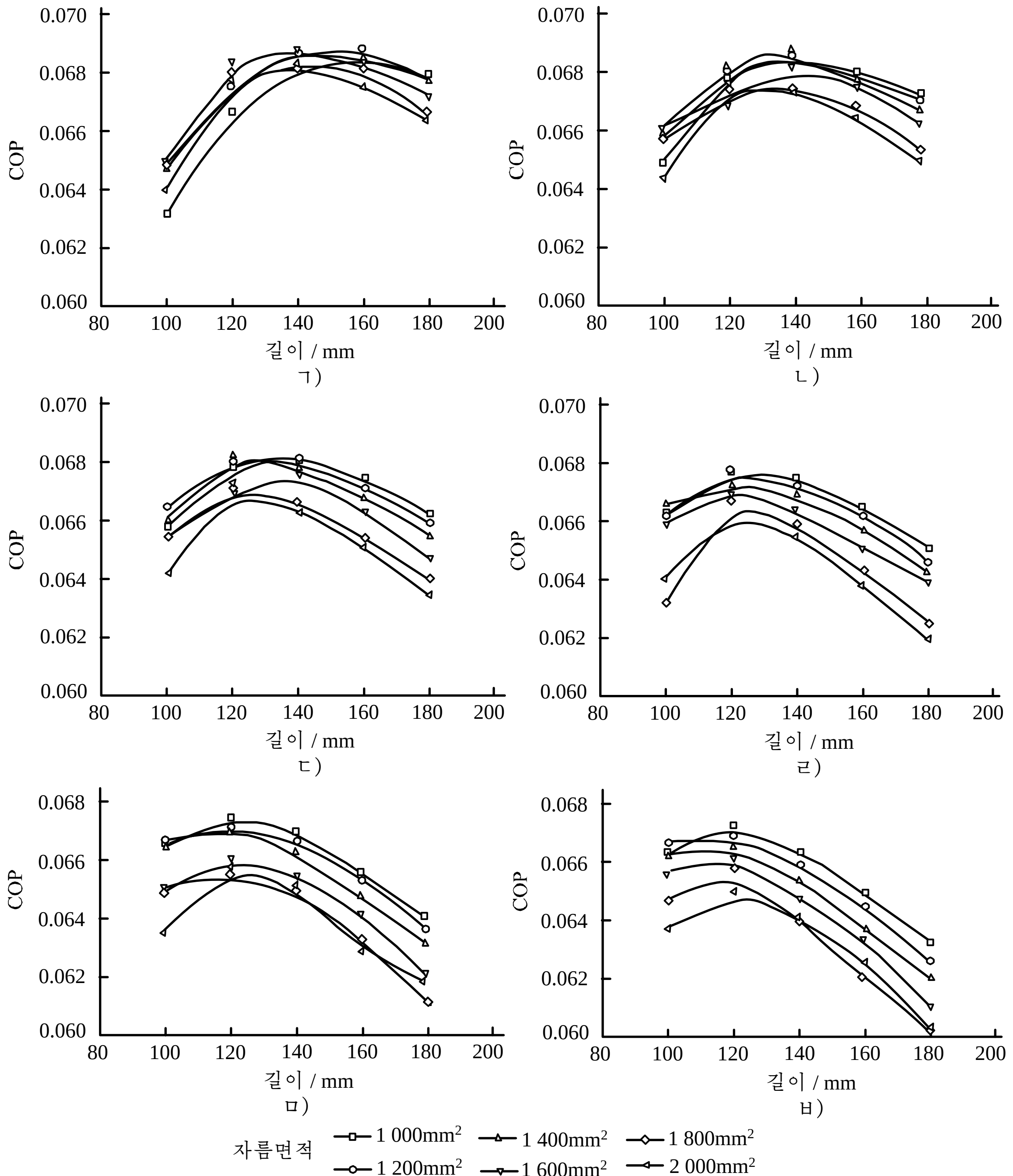


그림 2. 축랭기의 길이에 따르는 COP

평균압력 1.5MPa, 압력비 1.5, ㄱ)－ㅂ)는 각각 f=1.0, 1.2, 1.4, 1.6, 1.8, 2.0Hz인 경우

또한 그림 3을 통하여 운전주파수가 증가하는데 따라 COP가 최대로 되는 축랭기의 최적길이가 짧아지고 최적자름면적이 작아진다는것을 알수 있다. 운전주파수 1~2Hz의 전체 대역에서 COP가 최대로 되자면 축랭기의 길이와 자름면적을 130mm와 1 400mm^{2}로 정하는것이 합리적이라고 볼수 있다.

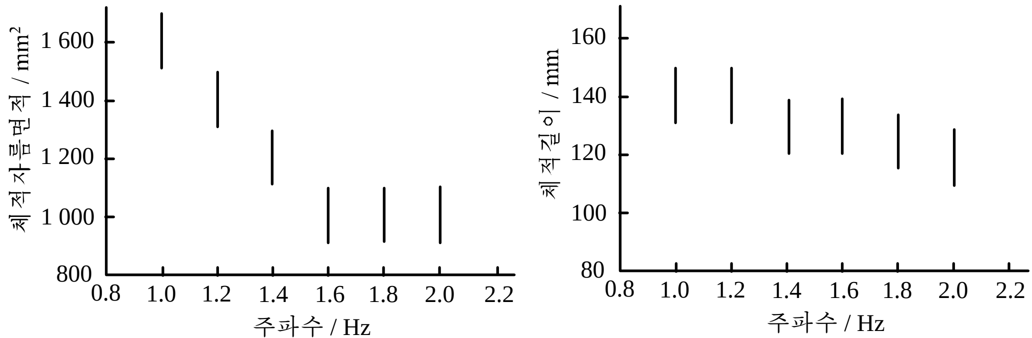


그림 3. 운전주파수에 따르는 축랭기의 최적자름면적과 최적길이
평균압력 1.5MPa, 압력비 1.5

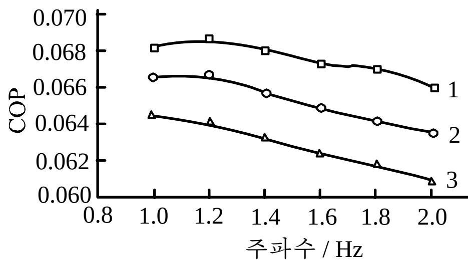


그림 4. COP의 주파수의존성
압력비 1.5
1－3은 평균압력이 각각 1.5, 1.7, 1.9MPa인 경우

다음으로 평균압력을 파라메터로 하여 COP의 주파수의존성을 고찰하였다. 그림 4를 통하여 알수 있는것처럼 최적주파수는 평균압력이 증가하는데 따라 낮아진다. 또한 COP는 평균압력이 증가하는데 따라 감소한다. 이것은 온도 40K이상에서 헬리움의 체적비열이 압력이 증가하는데 따라 커지므로 평균압력이 증가할 때 불수강금망축랭재와 헬리움기체사이의 불완전열교환으로 인한 축랭기손실이 커지는것과 관련된다.

맺 는 말

입구전력이 1kW정도로 작은 헬리움압축기로 구동하는 GM형팔스관랭동기의 축랭기를 최량설계하기 위한 방법론을 확립하고 축랭기의 자름면적과 길이를 각각 1 400mm², 130mm로 확정하였다.

참 고 문 헌

[1] J. M. Pfotenhauer et al.; Crycoolers, 13, 463, 2004.
[2] D. L. Liu et al.; Cryogenics, 81, 1, 8, 2017.
[3] Y. P. Banjare et al.; Cryogenics, 50, 3, 271, 2010.

주체108(2019)년 6월 5일 원고접수

Numerical Simulation Research for the Optimal Design of 40K Regenerator

Han Jong Ae, *Kim Kwang Son* and *Kim Yong Hwan*

We have established the method to design optimally the regenerator of GM type pulse tube cryocooler driven by helium compressor with about 1kW of input power. It has been confirmed that the optimal cross section and the length of the regenerator are 1 400mm^2 and 130mm, respectively.

Key words: regenerator, optimal design, helium compressor

김일성종합대학학보 물리학
주체108(2019)년 제65권 제4호

권양장치를 리용하는 천막식줄구조

류 철 주

줄구조의 계산에서는 매개 줄의 합리적인 곡선형태를 결정하는것도 중요하지만 전체적인 줄계의 작업상태를 원만하게 하면서도 경제적인 구조도식을 선정하는것도 중요하다.

그림 1과 같은 구조물에서 기본힘받이부재를 바줄로 하고 그우에 그물을 씌워 외부환경을 그대로 보존하는 경우에 효과적인 구조도식을 리용할수 있다. 다시말하여 천막식줄구조로서 중심에 기본지지기둥이 있고 이곳에서 뻗어나간 줄계를 주변기둥들로 받쳐주는 형식을 취할 때 내부기둥에 줄권양장치를 설치하여 그물에 실리는 일부 하중 실례로 눈하중 등을 고려하지 않아도 바줄에 가해지는 외부작용을 크게 줄일수 있다.

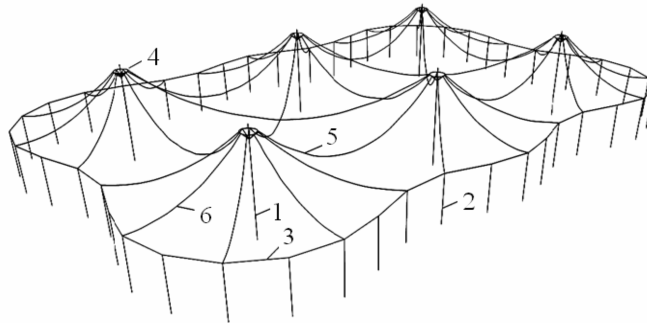


그림 1. 권양장치가 설치된 천막식줄구조
1－내부기둥, 2－외부기둥, 3－외부고리
4－바줄권양장치, 5－내부바줄, 6－외부바줄

평면크기가 135m×95m이고 지붕면도 큰 면적을 가지는 이 줄구조를 권양장치가 없이 해결하는 경우 강철그물의 자중이 큰것으로 하여 요구되는 그물면의 처짐을 보장하자면 많은 바줄로 계를 구성해야 하는데 1개의 내부기둥에 바줄을 설치할수 있는 수가 제한되여있고 하중분배와 계산도 매우 복잡해진다. 그러나 그림 1에서와 같이 내부기둥을 따라 바줄권양장치를 설치하면 눈이 쌓이는것을 비롯하여 외부하중이 큰 경우 권양장치로 줄을 필요한 높이까지 내려 외부하중을 제거하여 줄구조의 안전한 작업상태를 보장할수 있다.

론문에서는 바줄권양장치가 있는 천막식줄구조의 권양높이에 따르는 바줄의 계산에 대하여 보기로 한다.

줄의 계산조건을 보면 내부바줄의 경간은 45m, 최대처짐은 보통 작업상태에서 12m이며 외부바줄의 경간은 22.5m, 최대처짐은 보통 작업상태에서 3.4m이다.

먼저 내부바줄에 대하여 고찰하자.

내부바줄의 두 끝이 다 권양장치에 설치되는데 안전상 6개의 권양장치를 동시에 움직이므로 줄의 계산도식은 평행식 한가지만 고려하면 된다.

권양장치가 지면가까이에 내려왔을 때 줄은 땅에 닿으므로 계산하지 않는다.

그러므로 내부바줄의 최대처짐점이 지면에 닿기 전까지 해당되는 계산도식은 그림 2와 같다.

내부기둥에는 권양장치가 설치되여있으며 내부기둥으로 오는 줄끝은 권양장치에 련결된다.

줄의 자중은 0.002 48kN/m 이고 그물망의 하중은 $q = 0.05\text{kN/m}^2$ 이다.

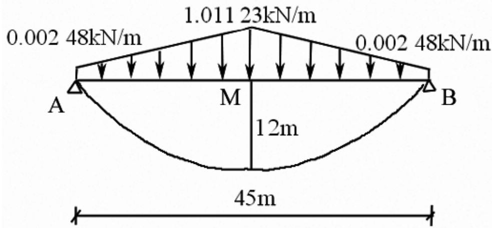


그림 2. 내부바줄의 계산도식

해석은 구조해석프로그람 SAP2000의 Cable요소를 리용하여 진행하였다.

줄에서의 장력은 끝과 중심에서 각각 $T_{\text{A, B}} = 19.963\text{kN}$, $T_{\text{M}} = 15.002\text{kN}$ 이다.

내부바줄은 좌우 대칭작업상태에 있으므로 중간지점에서의 장력은 곧 장력의 수평성분으로 되며 $H = 15.002\text{kN}$ 이다.

계산도식에서 하중이 그림 2에서처럼 설정된것은 내부바줄이 그물면에서 차지하는 하중몫에 따라 계산된것이다.

다음으로 외부바줄에 대하여 론의하자.

외부바줄은 작업상태에 따라 세가지로 나누어 고찰한다.

권양장치가 내부기둥의 24m수준에 있을 때 다시말하여 정상작업상태에 있는 경우와 권양장치를 내리우는 작업을 할 때 12m수준과 지면까지 내리운 경우로 고찰한다.

바줄과 그물면에 대한 조건은 내부바줄의 계산에서와 같다.

외부바줄의 계산에서는 권양장치에 따라 줄의 한끝이 오르내릴 때 바줄의 최대처짐을 계산하여 해석에 반영하는것이 무엇보다 중요하다. 여기서 최대처짐을 계산할 때 줄길이를 아는것으로 보고 최대처짐을 계산할수 있다. 외부기둥에서 줄끝이 설치된 높이는 12m이다.

권양장치가 24m수준에 있는 경우(정상작업상태) 외부바줄의 끝점 A는 외부기둥에 고정되여있고 끝점 B는 권양장치의 정상높이(24m)에 있다.

분포하중은 외부바줄이 그물면에서 차지하는 면적비에 따라 계산한다.(그림 3)

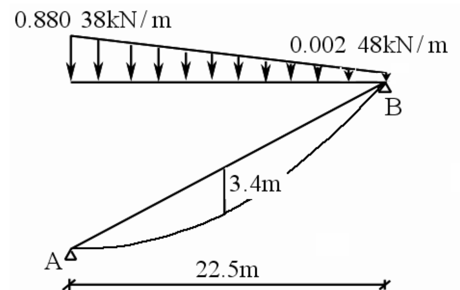


그림 3. 정상작업상태에서 외부바줄의 계산도식

그림 3에서 보는바와 같이 정상작업상태에서 외부바줄의 최대처짐은 3.4m이다.

해석결과를 보면 줄끝에서의 장력은 각각 $T_{\text{A}} = 10.470\text{kN}$, $T_{\text{B}} = 10.421\text{kN}$, 장력의 수평성분은 지점의 수평반력과 같은데 $H = 10.421\text{kN}$ 이다.

권양장치가 12m수준에 있는 경우(두 지점이 같은 높이에 있는 경우) 외부바줄의 안쪽 끝점 B가 권양장치에 의해 12m수준까지 내려와 지점 A와 같은 높이에 있다.

권양장치가 내려오면서 줄의 형태와 최대처짐도 변한다.

줄의 길이변화가 매우 작다고 가정하고 정상상태에서의 줄길이를 줄의 처짐선의 방정식에 대입하여 이 경우에 해당한 줄의 최대처짐을 계산하면 6.1m이다.

줄의 한끝을 권양장치로 내리웠으므로 줄이 그물면에서 차지하는 하중면적비는 달라지지 않는다.

해석결과를 보면 줄끝에서의 장력은 각각 $T_{\text{A}} = 9.194\text{kN}$, $T_{\text{B}} = 6.149\text{kN}$, 장력의 수평

성분은 $H = 4.992\text{kN}$ 이다.

권양장치를 지면까지 내리운 경우 외부바줄의 끝점 B가 권양장치에 의하여 지면까지 도달하여 두 끝지점의 높이차는 첫째 경우와 반대로 되여있지만 하중이 크지 않으므로 최대처짐은 3.4m로 볼수 있다.

해석결과를 보면 줄끝에서의 장력은 각각 $T_A = 15.396\text{kN}$, $T_B = 8.576\text{kN}$, 장력의 수평성분은 $H = 8.621\text{kN}$ 이다.

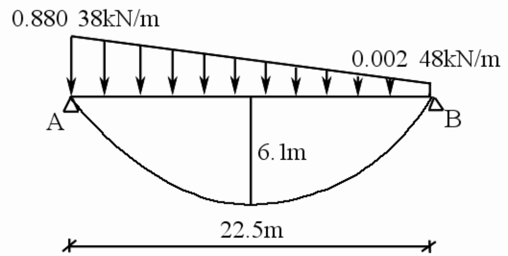


그림 4. 평행작업상태에서 외부바줄의 계산도식

줄계에서 기본문제는 바줄선정이다.

바줄에 작용하는 내력을 결정한 후에 바줄은 그것의 믿음성, 세기저하, 재료세기 등을 고려하여 다음의 공식으로 결정한다.[1, 2]

$$N_{극계} = N \times \gamma_f / \gamma_w / k \quad (*)$$

여기서 $N_{극계}$ 는 선정되는 바줄의 계산극한세기, N 은 해석한 줄의 최대장력, γ_f, γ_w 는 믿음성결수로서 $\gamma_f = 1.6$, $\gamma_w = 0.9$ 이며 k 는 세기저하결수로서 $k = 0.81 \sim 0.85$ 이다.

표. 각 경우에 따르는 바줄의 장력

	해석경우			
	내부바줄	외부바줄 1	외부바줄 2	외부바줄 3
계산장력	19.963kN	14.320kN	9.194kN	15.396kN

내부바줄장력의 계산값은 19.963kN이다.

식 (*)에 따라 내부바줄의 계산극한세기를 구하면 다음과 같다.

$$N_{극계-내} = N \times \gamma_f / \gamma_w / k = 19.963 \times 1.6/0.9/0.81 = 43.815(\text{kN})$$

외부바줄의 계산극한세기를 구할 때에는 세경우중 장력이 제일 큰 경우의 내력을 계산장력으로 보고 계산한다.

계산한 결과 $N = 15.396\text{kN}$ 이다.

$$N_{극계-외} = N \times \gamma_f / \gamma_w / k = 15.396 \times 1.6/0.9/0.81 = 33.791(\text{kN})$$

따라서 내부바줄은 계산극한세기 43.815kN이 보장되는 줄로, 외부바줄은 계산극한세기 33.791kN이 보장되는 줄로 선택하여야 한다.

맺 는 말

바줄권양장치를 리용하면 건축면적이 큰 줄구조물을 눈하중과 같은 일부 외부하중의 요인을 고려하지 않고 설계할수 있으므로 줄구조를 구성하는 줄의 수와 그물의 하중을 최대한 줄일수 있고 이로부터 많은 자재를 절약할수 있을뿐아니라 줄구조의 운영에서도 안전성을 담보할수 있다.

줄구조에서는 줄이 기본힘받이부재인것만큼 줄계가 안정한 작업상태에서 하중을 충분히 받아줄수 있게 하는 구조도식을 결정하는것이 중요한 의의를 가진다.

참 고 문 헌

[1] 한성규 등; 건축공학총서(구조설계 2), 공업출판사, 227～230, 주체90(2001).
[2] 周利利 等; 結构选型技巧与实例精解, 化学工业大学出版社, 12, 160, 2016.

주체108(2019)년 6월 5일 원고접수

Tent-Shape Cable Structure Using Hoist

Ryu Chol Ju

In this paper we suggested a method calculating the cable structure, which could make mechanical analysis easier and make sure mechanical behavior and safety, unaffected by the influence of such big load as snow load, by using the hoist on the inner columns of the tent-shape cable structure covering large area.

Key words: cable, hoist, tent-shape

김일성종합대학학보 주체108(2019)년
물리학 제65권 제4호

해석정밀형삽입원자방법에 의한 조밀륙방구조 Zr-X 2원합금들의 형성엔탈피와 희석열계산

리준일, 진학선

해석수정형삽입원자방법[1-3]을 개선하여 1개 원자가 차지하는 체적이 일정한 조건에서 체심립방, 면심립방, 조밀륙방구조들에서의 결합에네르기차의 계산결과와 실험결과와의 일치성을 훨씬 높이고 Ag, Au, Cu의 구조안정성문제를 해결할수 있는 해석정밀형삽입원자방법[5-8]이 제기되였다.

론문에서는 해석정밀형삽입원자방법포텐샬을 조밀륙방구조의 Zr-X 2원합금의 형성엔탈피와 희석열계산에 적용하기 위한 문제를 고찰하였다.

리론 및 방법

조밀륙방금속에 대한 해석정밀형삽입원자방법에서 2체포텐샬의 형식은 다음과 같다.[6]

$$\phi(r)=\begin{cases}\sum_{j=-1}^{4}k_j\left(\frac{r}{r_1}\right)^j & (r\le r_5)\\ \sum_{j=0}^{7}l_j\left(\frac{r}{r_5}-1\right)^j & (r_5<r\le r_c)\\ 0 & (r>r_c)\end{cases}\tag{1}$$

여기서 $r_i(i=1, 2, \cdots)$ 는 가장 안정한 평형상태의 조밀륙방결정에서의 i 번째 린접거리를 표시한다. 또한 r_5 와 r_c 에서의 강화된 련속원활조건을 리용하여 $k_j(j=-1\sim 4)$ 로부터 $l_j(j=0\sim 7)$ 를 결정하는 식들은 선행연구[6]에서와 일치한다. 선행연구[3]에서와는 달리 조밀륙방-체심립방 혹은 조밀륙방-면심립방구조사이의 결합에네르기차를 입력파라메터로 더 받아들이였다.

선행연구[8]에서 제기한 합금포텐샬형식은 $\phi^{ab}(r)=[\phi^a(r)f^b(r)/f^a(r)+\phi^b(r)f^a(r)/f^b(r)]/2$ 이다. 여기서 첨자 a와 b는 각각 합금원소 a와 b를 의미한다. 전자밀도함수 $f^a(r)$ 와 $f^b(r)$ 에 들어가는 전자밀도파라메터 f_e^a 와 f_e^b 는 식 $f_e=[(E_c-E_{1f})/\Omega]^{3/5}$ 으로부터 결정한다.[3] 조밀륙방-조밀륙방 2원합금의 살창상수는 $a=(1-x)a^a+xa^b$ 에 의하여 결정하며 여기서 a^a , a^b 는 각각 가장 안정한 평형상태에서 합금원소 a로만 이루어진 조밀륙방결정과 합금원소 b로만 이루어진 조밀륙방결정의 살창상수이다. 해석수정형삽입원자방법포텐샬을 리용하여 조밀륙방-조밀륙방 2원합금의 형성엔탈피를 계산하는 공식은 다음과 같다.

$$\Delta H=\left[E_c^{\mathrm{a}}+\frac{1}{2}\varPhi^{\mathrm{a}}+F^{\mathrm{a}}(\rho)+M^{\mathrm{a}}(P)\right](1-x)+\left[E_c^{\mathrm{b}}+\frac{1}{2}\varPhi^{\mathrm{b}}+F^{\mathrm{b}}(\rho)+M^{\mathrm{b}}(P)\right]x \qquad (2)$$

여기서 조밀륙방금속에 대한 2체포텐샬함수의 절단반경[4]을 $r_c=(6a+\sqrt{a^2+c^2})/4>r_7$ 로 설정[2]한것과 실제조밀륙방구조의 특성을 고려하면 합금원소 a와 b의 2체포텐샬에네르기들은 각각 다음과 같이 된다.

$$\begin{aligned}\varPhi^{\mathrm{a}}(r)=&[6\phi^{\mathrm{a}}(r_1)+6\phi^{\mathrm{a}}(r_2)+6\phi^{\mathrm{a}}(r_3)+2\phi^{\mathrm{a}}(r_4)+12\phi^{\mathrm{a}}(r_5)+6\phi^{\mathrm{a}}(r_6)+12\phi^{\mathrm{a}}(r_7)](1-x)+\\&+[6\phi^{\mathrm{ab}}(r_1)+6\phi^{\mathrm{ab}}(r_2)+6\phi^{\mathrm{ab}}(r_3)+2\phi^{\mathrm{ab}}(r_4)+12\phi^{\mathrm{ab}}(r_5)+6\phi^{\mathrm{ab}}(r_6)+12\phi^{\mathrm{ab}}(r_7)]x\end{aligned} \qquad (3)$$

$$\begin{aligned}\varPhi^{\mathrm{b}}(r)=&[6\phi^{\mathrm{b}}(r_1)+6\phi^{\mathrm{b}}(r_2)+6\phi^{\mathrm{b}}(r_3)+2\phi^{\mathrm{b}}(r_4)+12\phi^{\mathrm{b}}(r_5)+6\phi^{\mathrm{b}}(r_6)+12\phi^{\mathrm{b}}(r_7)]x+\\&+[6\phi^{\mathrm{ab}}(r_1)+6\phi^{\mathrm{ab}}(r_2)+6\phi^{\mathrm{ab}}(r_3)+2\phi^{\mathrm{ab}}(r_4)+12\phi^{\mathrm{ab}}(r_5)+6\phi^{\mathrm{ab}}(r_6)+12\phi^{\mathrm{ab}}(r_7)](1-x)\end{aligned} \qquad (4)$$

여기서 $\rho=(1-x)\rho^{\mathrm{a}}+x\rho^{\mathrm{b}}$, $P=(1-x)P^{\mathrm{a}}+xP^{\mathrm{b}}$ 이고 전자밀도함수의 절단반경을 $r_{cf}=2a+\left(\sqrt{13a^2/3+c^2/4}-2a\right)\cdot\frac{3}{4}>r_8$ 로 설정한것을 고려하면 ρ^{a}, ρ^{b}, P^{a}, P^{b} 들은 다음과 같다.

$$\begin{aligned}\rho^{\mathrm{a}}=&N_1f^{\mathrm{a}}(r_1)+N_2f^{\mathrm{a}}(r_2)+N_3f^{\mathrm{a}}(r_3)+N_4f^{\mathrm{a}}(r_4)+N_5f^{\mathrm{a}}(r_5)+N_6f^{\mathrm{a}}(r_6)+N_7f^{\mathrm{a}}(r_7)+N_8f^{\mathrm{a}}(r_8)\\
P^{\mathrm{a}}=&N_1[f^{\mathrm{a}}(r_1)/r_1]^2(r_{1x}^2+r_{1y}^2+\beta r_{1z}^2)+N_2[f^{\mathrm{a}}(r_2)/r_2]^2(r_{2x}^2+r_{2y}^2+\beta r_{2z}^2)+\\
&+N_3[f^{\mathrm{a}}(r_3)/r_3]^2(r_{3x}^2+r_{3y}^2+\beta r_{3z}^2)+N_4[f^{\mathrm{a}}(r_4)/r_4]^2(r_{4x}^2+r_{4y}^2+\beta r_{4z}^2)+\\
&+N_5[f^{\mathrm{a}}(r_5)/r_5]^2(r_{5x}^2+r_{5y}^2+\beta r_{5z}^2)+N_6[f^{\mathrm{a}}(r_6)/r_6]^2(r_{6x}^2+r_{6y}^2+\beta r_{6z}^2)+\\
&+N_7[f^{\mathrm{a}}(r_7)/r_7]^2(r_{7x}^2+r_{7y}^2+\beta r_{7z}^2)+N_8[f^{\mathrm{a}}(r_8)/r_8]^2(r_{8x}^2+r_{8y}^2+\beta r_{8z}^2)\\
\rho^{\mathrm{b}}=&N_1f^{\mathrm{b}}(r_1)+N_2f^{\mathrm{b}}(r_2)+N_3f^{\mathrm{b}}(r_3)+N_4f^{\mathrm{b}}(r_4)+N_5f^{\mathrm{b}}(r_5)+N_6f^{\mathrm{b}}(r_6)+N_7f^{\mathrm{b}}(r_7)+N_8f^{\mathrm{b}}(r_8)\\
P^{\mathrm{b}}=&N_1[f^{\mathrm{b}}(r_1)/r_1]^2(r_{1x}^2+r_{1y}^2+\beta r_{1z}^2)+N_2[f^{\mathrm{b}}(r_2)/r_2]^2(r_{2x}^2+r_{2y}^2+\beta r_{2z}^2)+\\
&+N_3[f^{\mathrm{b}}(r_3)/r_3]^2(r_{3x}^2+r_{3y}^2+\beta r_{3z}^2)+N_4[f^{\mathrm{b}}(r_4)/r_4]^2(r_{4x}^2+r_{4y}^2+\beta r_{4z}^2)+\\
&+N_5[f^{\mathrm{b}}(r_5)/r_5]^2(r_{5x}^2+r_{5y}^2+\beta r_{5z}^2)+N_6[f^{\mathrm{b}}(r_6)/r_6]^2(r_{6x}^2+r_{6y}^2+\beta r_{6z}^2)+\\
&+N_7[f^{\mathrm{b}}(r_7)/r_7]^2(r_{7x}^2+r_{7y}^2+\beta r_{7z}^2)+N_8[f^{\mathrm{b}}(r_8)/r_8]^2(r_{8x}^2+r_{8y}^2+\beta r_{8z}^2)\end{aligned} \qquad (5)$$

여기서 $N_i(i=1, 2, \cdots, 8)$ 는 조밀륙방결정에서 제 i 번째 린접원자수로서 $6, 6, 6, 2, 12, 6, 12, 6$이다.

희석열계산에서는 선행연구[7]의 방법을 리용하여 4가지 요인에 의한 에네르기변화량을 고려하였다. 조밀륙방금속에 대한 해석정밀형삽입원자방법포텐샬에서 2체포텐샬의 절단반경을 $r_7 \sim r_8$ 에서 설정하였으므로 용매금속 a에서 원자 하나를 이동시키는것으로 하여 생기는 에네르기변화량은 다음과 같다.

$$E_1=-F^{\mathrm{a}}(\rho_e^{\mathrm{a}})-N_1\phi^{\mathrm{a}}(r_1^{\mathrm{a}})-N_2\phi^{\mathrm{a}}(r_2^{\mathrm{a}})-N_3\phi^{\mathrm{a}}(r_3^{\mathrm{a}})-N_4\phi^{\mathrm{a}}(r_4^{\mathrm{a}})-N_5\phi^{\mathrm{a}}(r_5^{\mathrm{a}})-N_6\phi^{\mathrm{a}}(r_6^{\mathrm{a}})-N_7\phi^{\mathrm{a}}(r_7^{\mathrm{a}}) \qquad (6)$$

여기서 ρ_e^{a} 는 가장 안정한 평형상태에서의 용매금속 a에서 살창원자위치에서의 전자밀도이며 용매금속 a에 1개의 용질원자 b를 삽입하는것으로 하여 생기는 에네르기변화량은

$$E_2=F^{\mathrm{b}}(\rho_e^{\mathrm{a}})+N_1\phi^{\mathrm{ab}}(r_1^{\mathrm{a}})+N_2\phi^{\mathrm{ab}}(r_2^{\mathrm{a}})+N_3\phi^{\mathrm{ab}}(r_3^{\mathrm{a}})+N_4\phi^{\mathrm{ab}}(r_4^{\mathrm{a}})+N_5\phi^{\mathrm{ab}}(r_5^{\mathrm{a}})+N_6\phi^{\mathrm{ab}}(r_6^{\mathrm{a}})+N_7\phi^{\mathrm{ab}}(r_7^{\mathrm{a}}) \qquad (7)$$

이다.

조밀륙방금속에 대한 해석정밀형삽입원자방법포텐샬에서 설정된 전자밀도함수의 절

단반경을 $r_8 \sim r_9$에서 설정한것을 고려하면 용매금속 a에서 원자 하나가 용질원자 b로 교체된 후 주위원자들에서 전자밀도분포의 변화로 생기는 에네르기변화량은 다음과 같다.

$$\begin{aligned} E_3 = & -(N_1+N_2+N_3+N_4+N_5+N_6+N_7+N_8)F^{\mathrm{a}}(\rho_e^{\mathrm{a}})+ \\ & +N_1[F^{\mathrm{a}}(\rho_1)+M^{\mathrm{a}}(P_1)]+N_2[F^{\mathrm{a}}(\rho_2)+M^{\mathrm{a}}(P_2)]+N_3[F^{\mathrm{a}}(\rho_3)+M^{\mathrm{a}}(P_3)]+ \\ & +N_4[F^{\mathrm{a}}(\rho_4)+M^{\mathrm{a}}(P_4)]+N_5[F^{\mathrm{a}}(\rho_5)+M^{\mathrm{a}}(P_5)]+N_6[F^{\mathrm{a}}(\rho_6)+M^{\mathrm{a}}(P_6)]+ \\ & +N_7[F^{\mathrm{a}}(\rho_7)+M^{\mathrm{a}}(P_7)]+N_8[F^{\mathrm{a}}(\rho_8)+M^{\mathrm{a}}(P_8)] \end{aligned} \tag{8}$$

여기서 $\rho_i (i=1\sim6)$와 $P_i (i=1\sim6)$는 다음과 같다.

$$\begin{aligned} \rho_1 = & (N_1-1)f^{\mathrm{a}}(r_1^{\mathrm{a}})+N_2f^{\mathrm{a}}(r_2^{\mathrm{a}})+N_3f^{\mathrm{a}}(r_3^{\mathrm{a}})+N_4f^{\mathrm{a}}(r_4^{\mathrm{a}})+N_5f^{\mathrm{a}}(r_5^{\mathrm{a}})+ \\ & +N_6f^{\mathrm{a}}(r_6^{\mathrm{a}})+N_7f^{\mathrm{a}}(r_7^{\mathrm{a}})+N_8f^{\mathrm{a}}(r_8^{\mathrm{a}})+f^{\mathrm{b}}(r_1^{\mathrm{a}}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P_1 = & (N_1-1)[f^{\mathrm{a}}(r_1)/r_1]^2(r_{1x}^2+r_{1y}^2+\beta r_{1z}^2)+N_2[f^{\mathrm{a}}(r_2)/r_2]^2(r_{2x}^2+r_{2y}^2+\beta r_{2z}^2)+N_3[f^{\mathrm{a}}(r_3)/r_3]^2(r_{3x}^2+r_{3y}^2+\beta r_{3z}^2)+ \\ & +N_4[f^{\mathrm{a}}(r_4)/r_4]^2(r_{4x}^2+r_{4y}^2+\beta r_{4z}^2)+N_5[f^{\mathrm{a}}(r_5)/r_5]^2(r_{5x}^2+r_{5y}^2+\beta r_{5z}^2)+N_6[f^{\mathrm{a}}(r_6)/r_6]^2(r_{6x}^2+r_{6y}^2+\beta r_{6z}^2)+ \\ & +N_7[f^{\mathrm{a}}(r_7)/r_7]^2(r_{7x}^2+r_{7y}^2+\beta r_{7z}^2)+N_8[f^{\mathrm{a}}(r_8)/r_8]^2(r_{8x}^2+r_{8y}^2+\beta r_{8z}^2)+[f^{\mathrm{b}}(r_1^{\mathrm{a}})]^2 \end{aligned}$$

$$\rho_2 = N_1f^{\mathrm{a}}(r_1^{\mathrm{a}})+(N_2-1)f^{\mathrm{a}}(r_2^{\mathrm{a}})+N_3f^{\mathrm{a}}(r_3^{\mathrm{a}})+N_4f^{\mathrm{a}}(r_4^{\mathrm{a}})+N_5f^{\mathrm{a}}(r_5^{\mathrm{a}})+N_6f^{\mathrm{a}}(r_6^{\mathrm{a}})+N_7f^{\mathrm{a}}(r_7^{\mathrm{a}})+N_8f^{\mathrm{a}}(r_8^{\mathrm{a}})+f^{\mathrm{b}}(r_2^{\mathrm{a}})$$

$$\begin{aligned} P_2 = & N_1[f^{\mathrm{a}}(r_1)/r_1]^2(r_{1x}^2+r_{1y}^2+\beta r_{1z}^2)+(N_2-1)[f^{\mathrm{a}}(r_2)/r_2]^2(r_{2x}^2+r_{2y}^2+\beta r_{2z}^2)+N_3[f^{\mathrm{a}}(r_3)/r_3]^2(r_{3x}^2+r_{3y}^2+\beta r_{3z}^2)+ \\ & +N_4[f^{\mathrm{a}}(r_4)/r_4]^2(r_{4x}^2+r_{4y}^2+\beta r_{4z}^2)+N_5[f^{\mathrm{a}}(r_5)/r_5]^2(r_{5x}^2+r_{5y}^2+\beta r_{5z}^2)+N_6[f^{\mathrm{a}}(r_6)/r_6]^2(r_{6x}^2+r_{6y}^2+\beta r_{6z}^2)+ \\ & +N_7[f^{\mathrm{a}}(r_7)/r_7]^2(r_{7x}^2+r_{7y}^2+\beta r_{7z}^2)+N_8[f^{\mathrm{a}}(r_8)/r_8]^2(r_{8x}^2+r_{8y}^2+\beta r_{8z}^2)+[f^{\mathrm{b}}(r_2^{\mathrm{a}})]^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \rho_3 = & N_1f^{\mathrm{a}}(r_1^{\mathrm{a}})+N_2f^{\mathrm{a}}(r_2^{\mathrm{a}})+(N_3-1)f^{\mathrm{a}}(r_3^{\mathrm{a}})+N_4f^{\mathrm{a}}(r_4^{\mathrm{a}})+N_5f^{\mathrm{a}}(r_5^{\mathrm{a}})+N_6f^{\mathrm{a}}(r_6^{\mathrm{a}})+ \\ & +N_7f^{\mathrm{a}}(r_7^{\mathrm{a}})+N_8f^{\mathrm{a}}(r_8^{\mathrm{a}})+f^{\mathrm{b}}(r_3^{\mathrm{a}}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P_3 = & N_1[f^{\mathrm{a}}(r_1)/r_1]^2(r_{1x}^2+r_{1y}^2+\beta r_{1z}^2)+N_2[f^{\mathrm{a}}(r_2)/r_2]^2(r_{2x}^2+r_{2y}^2+\beta r_{2z}^2)+ \\ & +(N_3-1)[f^{\mathrm{a}}(r_3)/r_3]^2(r_{3x}^2+r_{3y}^2+\beta r_{3z}^2)+N_4[f^{\mathrm{a}}(r_4)/r_4]^2(r_{4x}^2+r_{4y}^2+\beta r_{4z}^2)+ \\ & +N_5[f^{\mathrm{a}}(r_5)/r_5]^2(r_{5x}^2+r_{5y}^2+\beta r_{5z}^2)+N_6[f^{\mathrm{a}}(r_6)/r_6]^2(r_{6x}^2+r_{6y}^2+\beta r_{6z}^2)+ \\ & +N_7[f^{\mathrm{a}}(r_7)/r_7]^2(r_{7x}^2+r_{7y}^2+\beta r_{7z}^2)+N_8[f^{\mathrm{a}}(r_8)/r_8]^2(r_{8x}^2+r_{8y}^2+\beta r_{8z}^2)+[f^{\mathrm{b}}(r_3^{\mathrm{a}})]^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \rho_4 = & N_1f^{\mathrm{a}}(r_1^{\mathrm{a}})+N_2f^{\mathrm{a}}(r_2^{\mathrm{a}})+N_3f^{\mathrm{a}}(r_3^{\mathrm{a}})+(N_4-1)f^{\mathrm{a}}(r_4^{\mathrm{a}})+N_5f^{\mathrm{a}}(r_5^{\mathrm{a}})+N_6f^{\mathrm{a}}(r_6^{\mathrm{a}})+ \\ & +N_7f^{\mathrm{a}}(r_7^{\mathrm{a}})+N_8f^{\mathrm{a}}(r_8^{\mathrm{a}})+f^{\mathrm{b}}(r_4^{\mathrm{a}}) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} P_4 = & N_1[f^{\mathrm{a}}(r_1)/r_1]^2(r_{1x}^2+r_{1y}^2+\beta r_{1z}^2)+N_2[f^{\mathrm{a}}(r_2)/r_2]^2(r_{2x}^2+r_{2y}^2+\beta r_{2z}^2)+ \\ & +N_3[f^{\mathrm{a}}(r_3)/r_3]^2(r_{3x}^2+r_{3y}^2+\beta r_{3z}^2)+(N_4-1)[f^{\mathrm{a}}(r_4)/r_4]^2(r_{4x}^2+r_{4y}^2+\beta r_{4z}^2)+ \\ & +N_5[f^{\mathrm{a}}(r_5)/r_5]^2(r_{5x}^2+r_{5y}^2+\beta r_{5z}^2)+N_6[f^{\mathrm{a}}(r_6)/r_6]^2(r_{6x}^2+r_{6y}^2+\beta r_{6z}^2)+ \\ & +N_7[f^{\mathrm{a}}(r_7)/r_7]^2(r_{7x}^2+r_{7y}^2+\beta r_{7z}^2)+N_8[f^{\mathrm{a}}(r_8)/r_8]^2(r_{8x}^2+r_{8y}^2+\beta r_{8z}^2)+[f^{\mathrm{b}}(r_4^{\mathrm{a}})]^2 \end{aligned}$$

$$\rho_5 = N_1f^{\mathrm{a}}(r_1^{\mathrm{a}})+N_2f^{\mathrm{a}}(r_2^{\mathrm{a}})+N_3f^{\mathrm{a}}(r_3^{\mathrm{a}})+N_4f^{\mathrm{a}}(r_4^{\mathrm{a}})+(N_5-1)f^{\mathrm{a}}(r_5^{\mathrm{a}})+N_6f^{\mathrm{a}}(r_6^{\mathrm{a}})+N_7f^{\mathrm{a}}(r_7^{\mathrm{a}})+N_8f^{\mathrm{a}}(r_8^{\mathrm{a}})+f^{\mathrm{b}}(r_5^{\mathrm{a}})$$

$$\begin{aligned} P_5 = & N_1[f^{\mathrm{a}}(r_1)/r_1]^2(r_{1x}^2+r_{1y}^2+\beta r_{1z}^2)+N_2[f^{\mathrm{a}}(r_2)/r_2]^2(r_{2x}^2+r_{2y}^2+\beta r_{2z}^2)+N_3[f^{\mathrm{a}}(r_3)/r_3]^2(r_{3x}^2+r_{3y}^2+\beta r_{3z}^2)+ \\ & +N_4[f^{\mathrm{a}}(r_4)/r_4]^2(r_{4x}^2+r_{4y}^2+\beta r_{4z}^2)+(N_5-1)[f^{\mathrm{a}}(r_5)/r_5]^2(r_{5x}^2+r_{5y}^2+\beta r_{5z}^2)+N_6[f^{\mathrm{a}}(r_6)/r_6]^2(r_{6x}^2+r_{6y}^2+\beta r_{6z}^2)+ \\ & +N_7[f^{\mathrm{a}}(r_7)/r_7]^2(r_{7x}^2+r_{7y}^2+\beta r_{7z}^2)+N_8[f^{\mathrm{a}}(r_8)/r_8]^2(r_{8x}^2+r_{8y}^2+\beta r_{8z}^2)+[f^{\mathrm{b}}(r_5^{\mathrm{a}})]^2 \end{aligned}$$

$$\rho_6 = N_1 f^{\mathrm{a}}(r_1^{\mathrm{a}}) + N_2 f^{\mathrm{a}}(r_2^{\mathrm{a}}) + N_3 f^{\mathrm{a}}(r_3^{\mathrm{a}}) + N_4 f^{\mathrm{a}}(r_4^{\mathrm{a}}) + N_5 f^{\mathrm{a}}(r_5^{\mathrm{a}}) + (N_6 - 1) f^{\mathrm{a}}(r_6^{\mathrm{a}}) + N_7 f^{\mathrm{a}}(r_7^{\mathrm{a}}) + N_8 f^{\mathrm{a}}(r_8^{\mathrm{a}}) + f^{\mathrm{b}}(r_6^{\mathrm{a}})$$

$$\begin{aligned} P_6 = {} & N_1 [f^{\mathrm{a}}(r_1)/r_1]^2 (r_{1x}^2 + r_{1y}^2 + \beta r_{1z}^2) + N_2 [f^{\mathrm{a}}(r_2)/r_2]^2 (r_{2x}^2 + r_{2y}^2 + \beta r_{2z}^2) + N_3 [f^{\mathrm{a}}(r_3)/r_3]^2 (r_{3x}^2 + r_{3y}^2 + \beta r_{3z}^2) + \\ & + N_4 [f^{\mathrm{a}}(r_4)/r_4]^2 (r_{4x}^2 + r_{4y}^2 + \beta r_{4z}^2) + N_5 [f^{\mathrm{a}}(r_5)/r_5]^2 (r_{5x}^2 + r_{5y}^2 + \beta r_{5z}^2) + (N_6 - 1)[f^{\mathrm{a}}(r_6)/r_6]^2 (r_{6x}^2 + r_{6y}^2 + \beta r_{6z}^2) + \\ & + N_7 [f^{\mathrm{a}}(r_7)/r_7]^2 (r_{7x}^2 + r_{7y}^2 + \beta r_{7z}^2) + N_8 [f^{\mathrm{a}}(r_8)/r_8]^2 (r_{8x}^2 + r_{8y}^2 + \beta r_{8z}^2) + [f^{\mathrm{b}}(r_6^{\mathrm{a}})]^2 \end{aligned}$$

$$\rho_7 = N_1 f^{\mathrm{a}}(r_1^{\mathrm{a}}) + N_2 f^{\mathrm{a}}(r_2^{\mathrm{a}}) + N_3 f^{\mathrm{a}}(r_3^{\mathrm{a}}) + N_4 f^{\mathrm{a}}(r_4^{\mathrm{a}}) + N_5 f^{\mathrm{a}}(r_5^{\mathrm{a}}) + N_6 f^{\mathrm{a}}(r_6^{\mathrm{a}}) + (N_7 - 1) f^{\mathrm{a}}(r_7^{\mathrm{a}}) + N_8 f^{\mathrm{a}}(r_8^{\mathrm{a}}) + f^{\mathrm{b}}(r_7^{\mathrm{a}})$$

$$\begin{aligned} P_7 = {} & N_1 [f^{\mathrm{a}}(r_1)/r_1]^2 (r_{1x}^2 + r_{1y}^2 + \beta r_{1z}^2) + N_2 [f^{\mathrm{a}}(r_2)/r_2]^2 (r_{2x}^2 + r_{2y}^2 + \beta r_{2z}^2) + N_3 [f^{\mathrm{a}}(r_3)/r_3]^2 (r_{3x}^2 + r_{3y}^2 + \beta r_{3z}^2) + \\ & + N_4 [f^{\mathrm{a}}(r_4)/r_4]^2 (r_{4x}^2 + r_{4y}^2 + \beta r_{4z}^2) + N_5 [f^{\mathrm{a}}(r_5)/r_5]^2 (r_{5x}^2 + r_{5y}^2 + \beta r_{5z}^2) + N_6 [f^{\mathrm{a}}(r_6)/r_6]^2 (r_{6x}^2 + r_{6y}^2 + \beta r_{6z}^2) + \\ & + (N_7 - 1)[f^{\mathrm{a}}(r_7)/r_7]^2 (r_{7x}^2 + r_{7y}^2 + \beta r_{7z}^2) + N_8 [f^{\mathrm{a}}(r_8)/r_8]^2 (r_{8x}^2 + r_{8y}^2 + \beta r_{8z}^2) + [f^{\mathrm{b}}(r_7^{\mathrm{a}})]^2 \end{aligned}$$

$$\rho_8 = N_1 f^{\mathrm{a}}(r_1^{\mathrm{a}}) + N_2 f^{\mathrm{a}}(r_2^{\mathrm{a}}) + N_3 f^{\mathrm{a}}(r_3^{\mathrm{a}}) + N_4 f^{\mathrm{a}}(r_4^{\mathrm{a}}) + N_5 f^{\mathrm{a}}(r_5^{\mathrm{a}}) + N_6 f^{\mathrm{a}}(r_6^{\mathrm{a}}) + N_7 f^{\mathrm{a}}(r_7^{\mathrm{a}}) + (N_8 - 1) f^{\mathrm{a}}(r_8^{\mathrm{a}}) + f^{\mathrm{b}}(r_8^{\mathrm{a}})$$

$$\begin{aligned} P_8 = {} & N_1 [f^{\mathrm{a}}(r_1)/r_1]^2 (r_{1x}^2 + r_{1y}^2 + \beta r_{1z}^2) + N_2 [f^{\mathrm{a}}(r_2)/r_2]^2 (r_{2x}^2 + r_{2y}^2 + \beta r_{2z}^2) + N_3 [f^{\mathrm{a}}(r_3)/r_3]^2 (r_{3x}^2 + r_{3y}^2 + \beta r_{3z}^2) + \\ & + N_4 [f^{\mathrm{a}}(r_4)/r_4]^2 (r_{4x}^2 + r_{4y}^2 + \beta r_{4z}^2) + N_5 [f^{\mathrm{a}}(r_5)/r_5]^2 (r_{5x}^2 + r_{5y}^2 + \beta r_{5z}^2) + N_6 [f^{\mathrm{a}}(r_6)/r_6]^2 (r_{6x}^2 + r_{6y}^2 + \beta r_{6z}^2) + \\ & + N_7 [f^{\mathrm{a}}(r_7)/r_7]^2 (r_{7x}^2 + r_{7y}^2 + \beta r_{7z}^2) + (N_8 - 1)[f^{\mathrm{a}}(r_8)/r_8]^2 (r_{8x}^2 + r_{8y}^2 + \beta r_{8z}^2) + [f^{\mathrm{b}}(r_8^{\mathrm{a}})]^2 \end{aligned} \tag{9}$$

a원자를 b원자로 교체하는것으로 하여 생기는 결합에네르기변화량은 다음과 같다.

$$E_4 = -E_c^{\mathrm{a}} + E_c^{\mathrm{b}} \tag{10}$$

따라서 총에네르기변화량 즉 희석열은 E_1, E_2, E_3, E_4들의 합으로 된다.

결과 및 분석

6종의 조밀륙방구조의 Zr-X 2원합금들에 대한 합금원소의 몰분률에 따르는 형성엔탈피계산결과는 그림과 같다. 그림에서 보는바와 같이 Zr-Co, Zr-Re, Zr-Ru합금들에 대한 계산결과들은 계산결과들중에서 실험결과와 제일 잘 일치하며 특히 Zr-Co, Zr-Ru와 같은 Zr합금들에 대한 계산결과들은 실험결과와 거의 일치한다는것을 알수 있다. Zr-Re에 대한 계산결과는 실험결과와 합금원소의 몰분률이 0.3일 때에만 크게 차이나고 다른 몰분률들에서는 거의 일치한다.

그러나 이 합금에서도 해석수정형삽입원자방법의 결과[1]에 비하여 미에데마리론결과[2]와의 일치정도가 훨씬 개선되였다. 또한 Zr-Hf합금들에 대하여서도 해석수정형삽입원자방법에 의한 계산결과[1]에서 나타나던 진동특성도 기본적으로 없어졌다. Zr-Re에 대한 계산결과는 비록 실험결과와 차이나지만 미에데마리론의 결과[2]와 거의 일치한다. 이것은 해석정밀형삽입원자방법을 여러 몰분률을 가진 Zr-X 2원합금연구에 효과적으로 리용할수 있다는것을 보여준다. 해석수정형삽입원자방법의 결과들에 비하여 정확성이 훨씬 높아진것은 해석정밀형삽입원자방법포텐샬과 더 먼 린접원자들의 영향까지 고려하여 유도된 공식들의 정확성에 의한것이다.

8종의 Zr-X 2원합금들의 희석열계산 및 선행연구결과는 표와 같다. 표에서 첫 행은 론문계산결과, 둘째 행은 해석수정형삽입원자방법계산결과, 셋째 행은 해석형삽입원자방법계산결과, 넷째 행은 미에데마리론계산결과, 다섯째 행은 실험결과[1]이다.

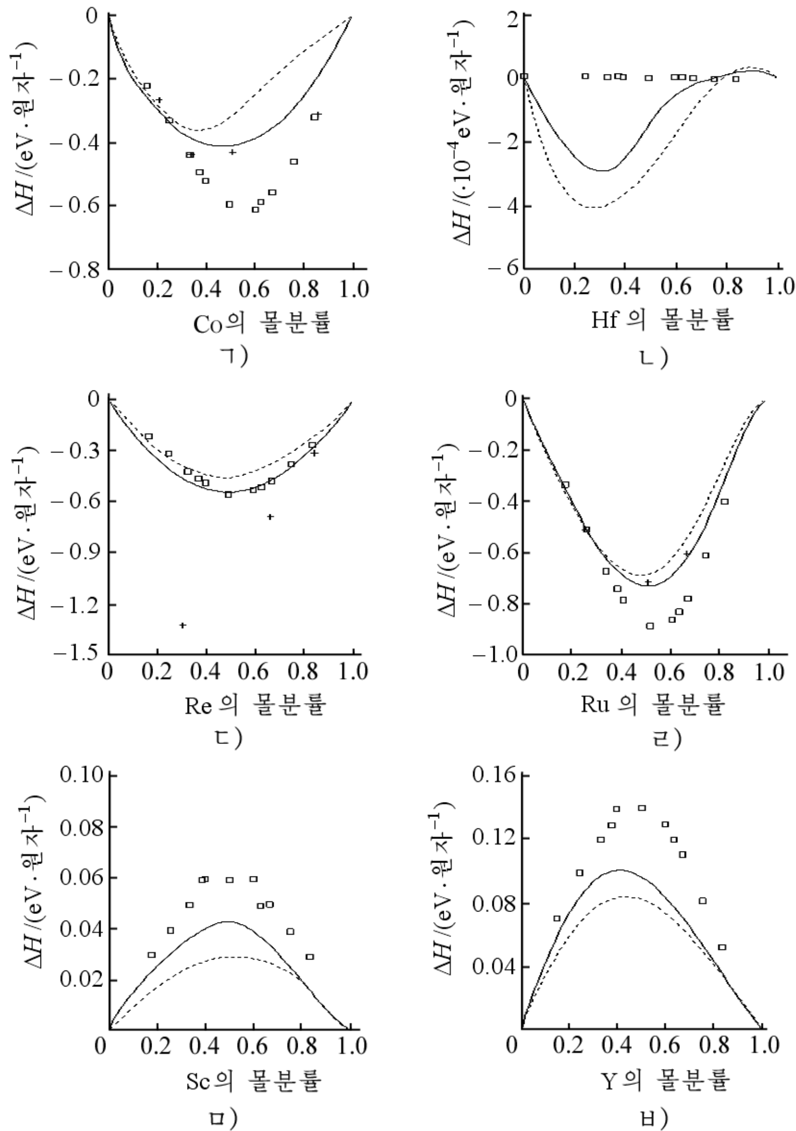


그림. 6종의 조밀륙방구조의 Zr-X 2원합금들에 대한
합금원소의 몰분률에 따르는 형성엔탈피계산결과
실선은 론문계산결과, 점선은 해석수정형삽입원자방법계산결과,
□는 미에데마리론계산결과, +는 실험결과[1]

표. 8종의 Zr-X 2원합금들의 희석열계산 및 선행연구[1]결과

용질	Co	Hf	Mg	Re	Ru	Sc	Ti	Y
	−1.60	−0.01	0.13	−1.48	−2.46	0.15	−0.02	0.41
	−2.61	−0.17	−	−1.89	−3.84	0.05	−0.45	0.10
용매(Zr)	−0.30	−0.01	−	−1.05	−0.49	0.05	0.04	0.17
	−1.42	−0.01	0.13	−1.34	−2.21	0.17	−0.01	0.44
	−	0	−	−	−	−	−0.03	−

표에서 보는바와 같이 Zr-Hf, Zr-Ti합금들에 대하여서는 다른 계산결과들에 비하여

실험결과와 더 잘 일치하며 특히 해석수정형삽입원자방법의 결과에 비하여 그 일치정도가 뚜렷이 개선되였다. 또한 Zr-Hf, Zr-Re, Zr-Sc, Zr-Ti, Zr-Y에서 계산결과와 미에데마리론계산결과는 거의 일치한다. 특히 Zr-Mg에서 계산결과는 미에데마리론의 계산결과와 완전히 일치하였다. Zr-Co, Zr-Ru, Zr-Ti에서 선행연구결과들과 미에데마리론계산결과는 잘 일치하지 않지만 계산결과들은 잘 일치한다.

표로부터 계산결과는 총체적으로 선행연구결과들보다 실험 및 미에데마리론의 계산결과와 잘 일치하는것으로 하여 믿음성이 더 높으며 해석정밀형삽입원자방법이 이미 제기된 해석형삽입원자방법들에 비하여 보다 정확하다는것을 알수 있다.

맺 는 말

해석정밀형삽입원자방법을 적용하여 6종의 조밀륙방구조의 Zr-X 2원합금들에 대한 합금원소의 몰분률에 따르는 형성엔탈피를 계산하였다. 또한 해석정밀형삽입원자방법을 적용하여 조밀륙방－조밀륙방 2원합금에서 희석열을 계산하기 위한 공식들을 유도하고 8종의 Zr-X 2원합금들의 희석열을 평가하였다.

참 고 문 헌

[1] B. Zhang et al.; Theory of Embedded Atom Method and its Application to Materials Science-Atomic Scale Materials Design Theory, Hunan University, 291～332, 2003.

[2] W. Hu et al.; Comp. Mater. Sci., 23, 175, 2002.

[3] W. Hu et al.; J. Phys. Condens. Matt., 13, 1193, 2001.

[4] H. Jin et al.; Appl. Phys., A 12, 189, 2015.

[5] H. Jin et al.; Appl. Phys., A 123, 257, 2017.

[6] C. Jon et al.; Rad. Eff. Def. Sol., 190, 575, 2017.

[7] R. A. Johnson; Phys. Rev., B 39, 17, 12554, 1989.

[8] B. Zhang, Y. Quyang; Z. Phys., B 92, 431, 1993.

주체108(2019)년 6월 5일 원고접수

Calculation of Formation Enthalpies and Dilution Heats of Hexagonal Close Packed Zr-X Binary Alloys by Precise Analytic Embedded Atom Method

Ri Jun Il, *Jin Hak Son*

We calculated the formation enthalpies of six kinds of the hexagonal close packed Zr-X binary alloys as functions of the concentrations of alloy elements by applying the precise analytic embedded atom method. We also derived the formulas to calculate the dilution heats of the hcp-hcp binary alloys with the precise analytic embedded atom method and evaluated the dilution heats of eight kinds of the Zr-X binary alloys.

Key words: formation enthalpy, dilution heat

CCD카메라의 중성자 및 γ선쪼임에 의한 화질변화특성

고병춘, 황철훈

위대한 령도자 **김정일**동지께서는 다음과 같이 교시하시였다.

《우리는 과학기술분야에서 이룩한 성과에 만족하지 말고 나라의 과학기술을 새로운 높은 단계에로 발전시키기 위하여 적극 투쟁하여야 합니다.》(《**김정일**선집》 증보판 제11권 133페지)

원자로주변을 비롯한 방사선환경에서 리용되는 CCD카메라들은 일반적으로 중성자와 γ선쪼임을 받으며 동작하게 된다. 이 과정에 반도체빛수감화소들속에 만들어지는 변위손상결함들과 이온화손상결함들은 카메라의 동작특성에 영향을 주며 촬영화상의 질을 떨어뜨린다.[1, 2]

론문에서는 몇가지 종류의 CCD카메라들에서 중성자와 γ선의 쪼임선량에 따르는 화질변화특성을 실험적으로 평가하고 화질변화물림새를 고찰하였다.

방사선쪼임실험

CCD카메라들에 대한 중성자쪼임은 10.8MeV까지의 련속에네르기스펙트르(평균에네르기 4.5MeV)를 가지며 세기가 $1.2\cdot10^6$개/s인 $^{239}\mathrm{Pu-Be}$원천을 리용하여 진행하였다. 한편 γ선쪼임은 $^{60}\mathrm{Co}$원천을 리용하여 진행하였는데 이 원천에서 복사되는 γ선들의 에네르기는 1.17, 1.33MeV(평균에네르기 1.25MeV)이며 선량세기는 0.009 8Gy/s이다.

CCD카메라들은 방온도에서 방사선이 렌즈를 통하여 화상수감부에 쪼임되도록 방사선원천앞에 설치하였으며 쪼임과정에 카메라들은 편의를 걸지 않은 상태에 있었다. 중성자 및 γ선쪼임선량에 따르는 CCD카메라의 화질변화특성은 암실조건의 화상에서 열화소수의 변화와 화소들사이의 전하전달률변화들을 측정하여 평가하였다. 암실조건의 화상에서 열화소수의 평가는 MATLAB의 화상처리도구를 리용하여 진행하였으며 전하전달률은 $^{241}\mathrm{Am}$의 γ선원천에 의한 섬광화상들을 처리하여 측정평가하였다.

실험에서 리용한 몇가지 CCD카메라들의 기술적특성은 표와 같다.

표. 몇가지 CCD카메라들의 기술적특성

CCD카메라 종류	화소수	화소크기(μm×μm)	렌즈두께/mm	전하전달률
KS720	720×1 280	3×3	3(석영)	0.999 94
STEBOO	480×640	6.45×6.45	1(수지)	0.999 92
LJ 4007	480×640	8.2×8.4	2(수지)	0.999 90

실험결과 및 분석

$1.6\cdot10^{12}$개/cm^{2}의 중성자쪼임과 200Gy(Si)의 γ선쪼임후 암실조건에서 KS720 CCD카메라의 화상들은 그림 1과 같다.

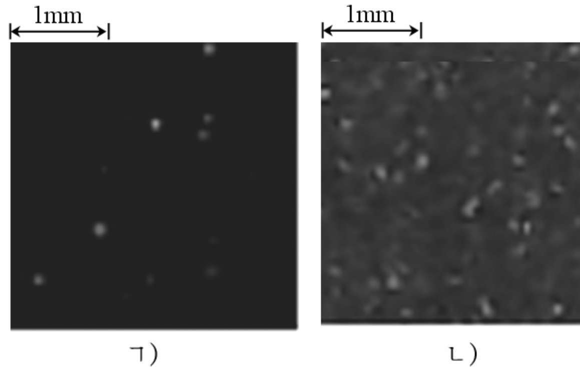


그림 1. 중성자(ㄱ)) 및 γ선(ㄴ))쪼임후 암실조건에서 KS720 CCD카메라의 화상

그림 1에서 보는바와 같이 중성자와 γ선쪼임한 경우에 암실조건에서 CCD카메라들의 화질변화특성이 서로 다르다는것을 알수 있다. 즉 중성자쪼임을 받은 카메라에서는 암실조건의 화상에서 열화소들이 뚜렷한 경계를 가지고 나타나지만 γ선쪼임의 경우에는 암실조건의 화상에서 대조도가 매우 낮은 불명확한 열화소들이 높은 밀도로 관측되였으며 화상에서 암실조건이 반영되지 못하고 일정한 세기의 밝은 배경화상이 형성되였다는것을 알수 있다.

CCD카메라들에서 중성자 및 γ선쪼임선량(D)에 따르는 전하전달률(η)의 변화에 대한 측정결과는 그림 2, 3과 같다.

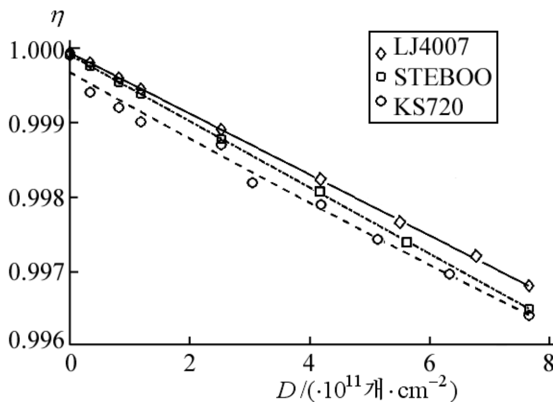


그림 2. CCD카메라들의 중성자쪼임선량에 따르는 전하전달률의 변화

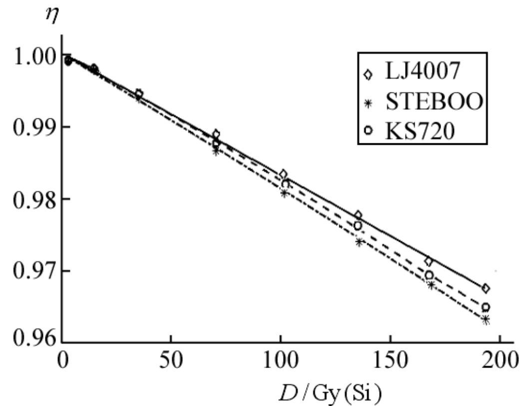


그림 3. CCD카메라들의 γ선쪼임선량에 따르는 전하전달률의 변화

CCD카메라의 빛수감화소들은 MOS구조의 콘덴샤로 되여있으며 그 체적의 대부분은 규소반도체로 되여있다.[2] 이 화소들에 고에네르기의 중성자를 쪼임하면 규소살창원자들과의 탄성충돌에 의한 변위손상에 의하여 A－중심(빈살창점－산소원자복합체)과 E－중심(빈살창점－린원자복합체), 쌍빈살창점들과 같은 살창결함들이 형성될수 있다. 이러한 결함복합체들은 화소에 입사한 빛량자들이 형성한 전자들에 대하여 포획중심으로 작용하며 따라서 암실조건의 화상에서 열화소들을 형성한다.

한편 γ선쪼임의 경우에는 ^{60}Co-γ선의 평균에네르기가 1.25MeV이고 CCD의 빛수감구역의 두께가 수 μm정도로 매우 얇으므로 화소에 변위효과에 의한 전자포획중심을 만들

확률은 매우 작다. 그러나 이러한 γ선은 CCD의 전극밑에 있는 얇은 규소산화물속에 이온화효과에 의하여 양이온들을 효과적으로 형성할수 있다. 한편 이 양이온들은 방온도조건에서 안정하게 존재하면서 그밑의 전하전달통로에 있는 전자들을 꿀롱인력으로 끌어당기므로 이때 CCD의 암실조건의 화상에서 열화소들이 형성될수 있다.

중성자쪼임경우에 생겨나는 열화소들의 크기가 γ선쪼임경우보다 더 크고 뚜렷한것은 중성자와 규소살창원자들사이 충돌카스케드에 의하여 미소화소구역안에 전자포획중심들이 집중되기때문이다. 이와 대조적으로 γ선쪼임경우 암실조건의 화상이 전반적으로 미약하고 기하학적으로 미세한 점들을 많이 포함하는것은 화상수감부의 웃면산화물층에 형성된 양이온들이 개별적으로 분산되여있기때문에 나타나는 현상이라고 볼수 있다.

γ선쪼임에 의한 이러한 열화소발생물림새는 KS720 CCD카메라가 ^{60}Co 원천으로 약 12h동안 γ선을 련속 쪼임한 후 촬영불가능하게 렬화되는 결과도 충분히 설명한다. 즉 CCD화상수감부의 규소산화물층에 γ선쪼임으로 형성된 양이온들의 밀도가 충분히 커지면 매 화소들의 전극들에 전하이동을 실현하기 위한 임풀스전압신호가 걸려도 화소내의 전자들이 양이온들의 강한 꿀롱인력때문에 이동할수 없게 되므로 전하결합소자로서의 동작을 할수 없게 되는것이다.

그림 2에서 보는바와 같이 CCD카메라에서 중성자쪼임선량이 커짐에 따라 화소들사이의 전하전달률은 선형감소를 나타내며 이러한 감소는 화소들의 기하학적크기가 작을수록 더 빨리 이루어진다. 이것은 화소의 크기가 작을수록 화소내부에 빛쪼임에 의하여 형성되는 전하수가 작아지며 따라서 방사선쪼임후 이웃화소에 전하들을 전달하는데서 포획중심들의 영향이 상대적으로 더 커진다는것을 의미한다. 여기에 화소들사이 전하전달을 실현하는 매몰통로층에 형성된 살창결함들의 영향도 더 첨부된다.

그림 3에서 보는바와 같이 γ선쪼임선량이 증가함에 따라 전하전달률이 감소하는것은 화소의 산화물(SiO_2)층속에 γ선의 이온화작용으로 형성된 양이온들에 의한 꿀롱포텐샬의 영향이 양이온의 밀도에 비례하며 CCD에서 화소들의 기하학적크기가 작을수록 화소들사이 전하이동(전하결합)을 실현하는 임풀스전압의 크기에 비해 양이온들에 의한 꿀롱포텐샬의 상대적영향이 더 커지기때문이다.

맺 는 말

1) 방사선쪼임선량이 증가할수록 CCD카메라 암실조건의 화상에서 열화소들의 수는 증가하며 화소들사이 전하전달률은 쪼임선량에 따라 선형감소한다.

2) CCD카메라 화소들의 기하학적크기가 작을수록 중성자 및 γ선쪼임에 의한 화질감소는 더 크게 나타난다.

참 고 문 헌

[1] Zujun Wang et al.; Nuclear Instruments and Methods in Physics Research, A 771, 49, 2015.
[2] J. Janesick et al.; IEEE Trans. Nucl. Sci., NS 36, 572, 1989.

주체108(2019)년 6월 5일 원고접수

Study on the Image Quality Change Characteristics of CCD Camera by Neutron and γ Ray Irradiation

Ko Pyong Chun, *Hwang Chol Hun*

The increase of radiation dose makes the number of hot pixels be larger and the charge transfer efficient between pixels be smaller in images of CCD camera under dark room condition.

The smaller the geometric sizes of CCD pixels, the larger the image degradation by neutron and γ ray irradiation is.

Key words: CCD camera, radiation irradiation, image quality change

일반화된 하트리-포크방정식풀이에서 자체모순없는 마당방법적용

김영성, 김태성, 오수일

위대한 령도자 **김정일**동지께서는 다음과 같이 교시하시였다.

《모든 과학자, 기술자들이 과학기술발전의 추세에 맞게 첨단과학과 기초과학발전에 힘을 넣어 나라의 과학기술을 세계적수준에 올려세우도록 하여야 합니다.》(《**김정일**선집》 증보판 제20권 62페지)

일반화된 하트리－포크방정식[1]은 련립비선형미적분방정식으로서 보통의 계산수학적 방법을 적용하여서는 풀기 어렵다. 전체 파동함수를 개별립자들의 자리표의 파동함수들로 변수분리하는 한립자근사를 도입하여 량자다체문제를 취급하기 위한 하트리방정식이 제기된 후 한립자근사에서 립자계의 교환상관을 고려하여 립자계의 전체 파동함수를 슬레이터행렬식형태로 놓고 근사를 진행한 하트리－포크방정식으로 개선되였다.

하트리－포크방정식을 풀기 위해서 적용되는 중요한 근사들중의 하나는 중심력마당근사이며 다른 하나는 비국부호상작용인 교환항을 유효국부포텐샬로 바꾸는 근사이다.[2, 3]

론문에서는 일반화된 하트리－포크방정식을 푸는데서 나서는 자체모순없는 마당방법 알고리듬에 대하여 고찰하였다.

1. 일반화된 하트리-포크방정식의 구대칭화

다립자계의 에네르기준위들을 동시에 구할수 있는 일반화된 하트리－포크방정식은 다음과 같다.[1]

$$\sum_{\beta} b_{\beta} \sum_{P} \varepsilon_P \left(\sum_{i=1}^{N} \langle \beta_i' | \hat{f}_i | P\beta_i \rangle \prod_{k\neq i}^{N} \delta_{\beta_k', P\beta_k} + \sum_{i=1}^{N} \sum_{j>i}^{N} \langle \beta_i' \beta_j' | \hat{g}_{ij} | P\beta_i P\beta_j \rangle \prod_{k\neq i,j}^{N} \delta_{\beta_k', P\beta_k} \right) = \mu b_{\beta'} \tag{1}$$

$$\sum_{\beta'\beta} b_{\beta'}^{*} b_{\beta} \sum_{P} \varepsilon_P \left(\sum_{i=1}^{N} \hat{f}_i | P\beta_i \rangle \delta_{\beta_i' l} \prod_{k\neq i}^{N} \delta_{\beta_k', P\beta_k} + \sum_{i=1}^{N} \sum_{j\neq i}^{N} \langle \beta_j' | \hat{g}_{ij} | P\beta_j \rangle | P\beta_i \rangle \delta_{\beta_i' l} \prod_{k\neq i,j}^{N} \delta_{\beta_k', P\beta_k} \right) = \lambda_p | p \rangle \tag{2}$$

여기서 상태벡토르 $|\beta_i\rangle$는

$$|\beta_i\rangle = |nlm\rangle = \frac{R_{nl}(r)}{r} Y_{lm}(\Omega) \tag{3}$$

를 의미한다. 상태벡토르를 구면함수로 표시한것은 핵력을 중심력으로만 고찰하기때문이다. 여기서 스핀－궤도호상작용은 고찰하지 않는다.

먼저 식 (1)의 운동에네르기항을 계산하자. 간단히 표시하기 위하여 첨수에서 i를 1로, j를 2로 표시한다.

$$\langle\beta_i'|\hat{f}_i|P\beta_i\rangle=\langle n_1'l_1'm_1'|\hat{f}_i|n_1l_1m_1\rangle=-\frac{1}{2}\int dr\int d\Omega R_{n_1'l_1'}(r)Y_{l_1'm_1'}(\Omega)\Delta R_{n_1l_1}(r)Y_{l_1m_1}(\Omega)\qquad(4)$$

$\Delta=(\Delta_r+\Delta_\Omega)/r^2$ 와 구면함수의 직교성과 고유값문제

$$\int d\Omega Y_{l_1'm_1'}(\Omega)Y_{l_1m_1}(\Omega)=\delta_{l_1'l_1}\delta_{m_1'm_1},\quad -\Delta_\Omega Y_{l_1m_1}(\Omega)=l_1(l_1+1)Y_{l_1m_1}(\Omega)\qquad(5)$$

와 동경부분파동함수의 직교성

$$\int dr\,R_{n_1'l_1}(r)R_{n_1l_1}(r)=\delta_{n_1'n_1}\qquad(6)$$

을 고려하면 식 (4)는 다음과 같이 표시된다.

$$\begin{aligned}\langle\beta_i'|\hat{f}_i|P\beta_i\rangle&=-\frac{1}{2}\int drr^2\int d\Omega\frac{R_{n_1'l_1'}(r)}{r}Y_{l_1'm_1'}(\Omega)\Delta\frac{R_{n_1l_1}(r)}{r}Y_{l_1m_1}(\Omega)=\\&=-\frac{1}{2}\delta_{l_1'l_1}\delta_{m_1'm_1}\int dr\,R_{n_1'l_1'}(r)\left[\frac{d^2}{dr^2}-\frac{l_1(l_1+1)}{r^2}\right]R_{n_1l_1}(r)\end{aligned}\qquad(7)$$

다음 식 (1)의 포텐샬부분을 계산하자.

$$\begin{aligned}&\langle\beta_i'\beta_j'|\hat{g}_{ij}|P\beta_iP\beta_j\rangle=\langle n_1'l_1'm_1';n_2'l_2'm_2'|\hat{g}_{ij}|n_1l_1m_1;n_2l_2m_2\rangle=\\&=\int dr_1dr_2R_{n_1'l_1'}(r_1)R_{n_2'l_2'}(r_2)R_{n_1l_1}(r_1)R_{n_2l_2}(r_2)\int d\Omega_1d\Omega_2Y^*_{l_1'm_1'}(\Omega_1)Y^*_{l_2'm_2'}(\Omega_2)v(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)Y_{l_1m_1}(\Omega_1)Y_{l_2m_2}(\Omega_2)\end{aligned}\qquad(8)$$

여기서 핵력포텐샬을 중심력으로 보는 경우 $v(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2)$는 거리만의 함수로 표시된다. 따라서 핵력포텐샬을 다음과 같이 르쟝드르다항식으로 전개할수 있다.

$$v(|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|)=\sum_{l=0}^{\infty}C_l(r_1,r_2)P_l(\cos\omega_{12})\qquad(9)$$

여기서 ω_{12}는 벡토르 $\boldsymbol{r}_1$과 $\boldsymbol{r}_2$의 사이각이며 $C_l(r_1,r_2)$는 르쟝드르다항식전개결수로서

$$C_l(r_1,r_2)=\frac{2l+1}{2}\int_0^\pi v(|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|)P_l(\cos\theta)d\theta\qquad(10)$$

이며

$$P_l(\cos\omega_{12})=\frac{4\pi}{2l+1}\sum_{m=-l}^{l}Y^*_{lm}(\Omega_1)Y_{lm}(\Omega_2)\qquad(11)$$

이다. 이것을 식 (9)에 대입하면

$$v(|\boldsymbol{r}_1-\boldsymbol{r}_2|)=\sum_{l=0}^{\infty}\frac{4\pi}{2l+1}C_l(r_1,r_2)\sum_{m=-l}^{l}Y^*_{lm}(\Omega_1)Y_{lm}(\Omega_2)\qquad(12)$$

를 얻는다. 식 (12)를 식 (8)의 각부분적분에 대입하면 각부분은

$$\begin{aligned}&\int d\Omega_1d\Omega_2Y^*_{l_1'm_1'}(\Omega_1)Y^*_{l_2'm_2'}(\Omega_2)\sum_{l=0}^{\infty}\frac{4\pi}{2l+1}C_l(r_1,r_2)\sum_{m=-l}^{l}Y^*_{lm}(\Omega_1)Y_{lm}(\Omega_2)Y_{l_1m_1}(\Omega_1)Y_{l_2m_2}(\Omega_2)=\\&=\sum_{l=0}^{\infty}\frac{4\pi}{2l+1}C_l(r_1,r_2)\sum_{m=-l}^{l}\int d\Omega_1Y^*_{l_1'm_1'}(\Omega_1)Y^*_{lm}(\Omega_1)Y_{l_1m_1}(\Omega_1)\int d\Omega_2Y^*_{l_2'm_2'}(\Omega_2)Y_{lm}(\Omega_2)Y_{l_2m_2}(\Omega_2)\end{aligned}\qquad(13)$$

로 된다. 구면함수의 성질

$$\int d\Omega Y_{l_1m_1}(\Omega)Y_{l_2m_2}(\Omega)Y^*_{l_3m_3}(\Omega)=\sqrt{\frac{(2l_1+1)(2l_2+1)}{4\pi(2l_3+1)}}C^{l_3 0}_{l_1 0 l_2 0}C^{l_3m_3}_{l_1m_1l_2m_2} \tag{14}$$

을 리용하면(여기서 $C^{l_3 0}_{l_1 0 l_2 0}$, $C^{l_3m_3}_{l_1m_1l_2m_2}$ 는 클렙슈–고르단결수) 식 (13)은

$$\begin{aligned}&\sum_{l=0}^{\infty}\frac{4\pi}{2l+1}C_l(r_1,r_2)\sum_{m=-l}^{l}\int d\Omega_1 Y^*_{l_1'm_1'}(\Omega_1)Y^*_{lm}(\Omega_1)Y_{l_1m_1}(\Omega_1)\int d\Omega_2 Y^*_{l_2'm_2'}(\Omega_2)Y_{lm}(\Omega_2)Y_{l_2m_2}(\Omega_2)=\\&=\sqrt{\frac{(2l_2+1)(2l_1'+1)}{(2l_2'+1)(2l_1+1)}}\sum_{l=0}^{\infty}C_l(r_1,r_2)C^{l_1 0}_{l_1' 0 l 0}C^{l_2' 0}_{l_2 0 l 0}\sum_{m=-l}^{l}C^{l_1m_1}_{l_1'm_1'lm}C^{l_2'm_2'}_{l_2m_2lm}\end{aligned} \tag{15}$$

와 같이 된다. 클렙슈－고르단결수의 성질로부터 $m=m_1-m_1'=m_2'-m_2$ 가 나오는데 결국 식 (15)에서 m 에 관한 합기호는 없어진다. 즉

$$\begin{aligned}&\sum_{l=0}^{\infty}\frac{4\pi}{2l+1}C_l(r_1,r_2)\sum_{m=-l}^{l}\int d\Omega_1 Y^*_{l_1'm_1'}(\Omega_1)Y^*_{lm}(\Omega_1)Y_{l_1m_1}(\Omega_1)\int d\Omega_2 Y^*_{l_2'm_2'}(\Omega_2)Y_{lm}(\Omega_2)Y_{l_2m_2}(\Omega_2)=\\&=\delta_{m_1-m_1',\,m_2'-m_2}\sqrt{\frac{(2l_2+1)(2l_1'+1)}{(2l_2'+1)(2l_1+1)}}\sum_{l=0}^{\infty}C_l(r_1,r_2)C^{l_1 0}_{l_1' 0 l 0}C^{l_2' 0}_{l_2 0 l 0}C^{l_1m_1}_{l_1'm_1'lm_1-m_1'}C^{l_2'm_2'}_{l_2m_2lm_2'-m_2}\end{aligned}$$

이다. 따라서 식 (8)은 다음과 같다.

$$\begin{aligned}&\left\langle\beta_i'\beta_j'\left|\hat g_{ij}\right|P\beta_iP\beta_j\right\rangle=\delta_{m_1-m_1',\ m_2'-m_2}\sqrt{\frac{(2l_2+1)(2l_1'+1)}{(2l_2'+1)(2l_1+1)}}\cdot\\&\cdot\int dr_1dr_2R_{n_1'l_1'}(r_1)R_{n_2'l_2'}(r_2)R_{n_1l_1}(r_1)R_{n_2l_2}(r_2)\sum_{l=0}^{\infty}C_l(r_1,r_2)C^{l_1 0}_{l_1' 0 l 0}C^{l_2' 0}_{l_2 0 l 0}C^{l_1m_1}_{l_1'm_1'lm_1-m_1'}C^{l_2'm_2'}_{l_2m_2lm_2'-m_2}\end{aligned} \tag{16}$$

클렙슈–고르단결수의 성질로부터 l 의 값범위는 $|l_1-l_1'|$ 와 l_1+l_1', $|l_2-l_2'|$ 와 l_2+l_2' 사이에 있다. 결국 l 의 값범위는 $|l_1-l_1'|$ 와 $|l_2-l_2'|$ 둘중에서 최대값, l_1+l_1' 와 l_2+l_2' 둘중에서 최소값사이에 있다. 따라서 식 (1)을 푸는 문제는 b 에 관한 동차련립방정식

$$\sum_{\beta=1}^{W}H_{\beta'\beta}b_\beta=\mu b_{\beta'} \tag{17}$$

의 풀이를 구하는 문제로 된다. 이 문제는 행렬 $H_{\beta'\beta}$ 의 고유값문제로 된다. 여기서

$$H_{\beta'\beta}=\sum_P\varepsilon_P\left(\sum_{i=1}^{N}\langle\beta_i'|\hat f_i|P\beta_i\rangle\prod_{k\neq i}^{N}\delta_{\beta_k',P\beta_k}+\sum_{i=1}^{N}\sum_{j>i}^{N}\left\langle\beta_i'\beta_j'\left|\hat g_{ij}\right|P\beta_iP\beta_j\right\rangle\prod_{k\neq i,j}^{N}\delta_{\beta_k',P\beta_k}\right) \tag{18}$$

이다.

다음 식 (2)를 계산하기 위하여 식 (2)의 량변에 $\left|p\right\rangle$ 의 각부분 $\left|l_pm_p\right\rangle$ 를 스칼라적하면 다음과 같이 된다.

$$\begin{aligned}&\sum_{\beta\beta'}b^*_{\beta'}b_\beta\sum_P\varepsilon_P\left(\sum_{i=1}^{N}\left\langle l_pm_p\left|\hat f\right|n_1l_1m_1\right\rangle\delta_{\beta_i'p}\prod_{k\neq i}^{N}\delta_{\beta_k'P\beta_k}+\right.\\&\left.+\sum_{i=1}^{N}\sum_{j\neq i}^{N}\left\langle l_pm_p;n_2'l_2'm_2'\left|\hat g\right|n_1l_1m_1;n_2l_2m_2\right\rangle\delta_{\beta_i'p}\prod_{k\neq i,j}^{N}\delta_{\beta_k'P\beta_k}\right)=\\&=\lambda_p\left\langle l_pm_p\left|n_pl_pm_p\right.\right\rangle=\lambda_p\left|n_pl_p\right\rangle\end{aligned}$$

식 (1)을 계산할 때와 같은 절차를 거치면 운동에네르기부분은

$$\langle l_p m_p | \hat{f} | n_1 l_1 m_1 \rangle = \delta_{l_p l_1} \delta_{m_p m_1} \left[-\frac{1}{2} \frac{d^2}{dr^2} R_{n_1 l_1}(r) + \frac{l_1(l_1+1)}{2r^2} R_{n_1 l_1}(r) \right] \tag{19}$$

와 같이 되며 포텐샬부분은 다음과 같다.

$$\langle l_p m_p; n_2' l_2' m_2' | \hat{g} | n_1 l_1 m_1; n_2 l_2 m_2 \rangle = \delta_{m_1 - m_p, m_2' - m_2} R_{n_1 l_1}(r) \sqrt{\frac{(2l_2+1)(2l_p+1)}{(2l_2'+1)(2l_1+1)}} \cdot$$
$$\cdot \int dr_2 R_{n_2' l_2'}(r_2) R_{n_2 l_2}(r_2) \sum_{l=0}^{\infty} C_l(r, r_2) C_{l_p 0 l 0}^{l_1 0} C_{l_2 0 l 0}^{l_2' 0} C_{l_p m_p l m_1 - m_p}^{l_1 m_1} C_{l_2 m_2 l m_2' - m_2}^{l_2' m_2'} \tag{20}$$

식 (19)와 (20)을 식 (2)에 대입하고 정돈하면 다음과 같이 표현할수 있다.

$$A_p^{(p)}(r) R_{n_p l_p}(r) + \sum_{k \neq p}^{M} A_k^{(p)}(r) R_{n_k l_k}(r) = \lambda_{n_p l_p} R_{n_p l_p}(r) \tag{21}$$

여기서 $A_k^{(p)}(r)$는 식 (2)에서 p번째 식의 $R_{n_k l_k}(r)$결수들이며 $R_{n_k l_k}(r)$는 k번째 한립자상태의 동경부분파동함수이다.

2. 자체모순없는 마당방법

식 (21)은 련립미적분방정식으로서 보통의 계산수학적방법으로는 풀수 없다.

이제 식 (21)에서 결수 $A_k^{(p)}(r)$의 크기관계를 고찰하자. 식 (19)와 (20)에서 직교성 $\delta_{l_p l_1} \delta_{m_p m_1}$과 $\delta_{m_1 - m_p, m_2' - m_2}$에 의하여 주대각선성분들이 비대각선성분에 비하여 훨씬 크다는것을 알수 있다. 물리적으로 볼 때에도 p번째 준위에 핵자가 그 준위에 주는 영향이 다른 준위들에 놓이는 핵자들이 이 준위에 주는 영향보다 훨씬 크다는것은 자명하다.

이러한 고찰로부터 식 (21)에서 두번째 항은 핵자들의 상관효과를 반영한 항이라고 볼수 있다. 이 항을

$$\sum_{k \neq p}^{M} A_k^{(p)}(r) R_{n_k l_k}(r) = B_p^{(p)}(r) R_{n_p l_p}(r) \tag{22}$$

와 같이 변형시킬수 있다면 식 (21)은 다음과 같은 한립자파동함수에 관한 고유값문제로 넘어간다.

$$\widetilde{A}_p^{(p)}(r) R_{n_p l_p}(r) = \lambda_{n_p l_p} R_{n_p l_p}(r) \tag{23}$$

여기서

$$\widetilde{A}_p^{(p)}(r) = A_p^{(p)}(r) + B_p^{(p)}(r) \tag{24}$$

이다.

이제 $B_p^{(p)}(r)$를 구하는 방법에 대하여 고찰하자. 결수 $A_p^{(p)}(r)$와 $A_k^{(p)}(r)$ ($k \neq p$)의 노름관계

$$\| A_p^{(p)}(r) \| >> \| A_k^{(p)}(r) \| \qquad (k \neq p) \tag{25}$$

로부터

$$A_p^{(p)}(r)R_{n_pl_p}(r)+\sum_{k\neq p}^{M}A_k^{(p)}(r)R_{n_kl_k}(r)\approx(1+\Delta\lambda)A_p^{(p)}(r)R_{n_pl_p}(r)$$

로 놓을수 있다. 여기서

$$\Delta\lambda=\frac{\left\|\sum_{k\neq p}^{M}A_k^{(p)}(r)R_{n_kl_k}(r)\right\|}{\|A_p^{(p)}(r)R_{n_pl_p}(r)\|} \tag{26}$$

이다. 따라서

$$B_p^{(p)}(r)=\Delta\lambda A_p^{(p)}(r) \tag{27}$$

로 놓으면 근사적으로 식 (22)를 만족시킨다고 볼수 있다.

이상의 결과를 종합하면 자체모순없는 마당방법을 적용하는 순서는 다음과 같다.

첫째로, 초기 한립자동경부분파동함수들을 선택한 다음 방정식 (17)을 풀어 핵의 에네르기준위들과 전개결수 b_β 들을 구한다.

둘째로, 매 준위에 대응하는 전개결수 $A_k^{(p)}(r)$ 를 계산하고 식 (26), (27)에 따라 $B_p^{(p)}(r)$ 를 결정하며 식 (23)을 풀어 갱신된 한립자동경부분파동함수와 한립자분리에네르기를 구한다.

셋째로, 한립자동경부분파동함수와 한립자분리에네르기가 더이상 변하지 않을 때까지 우의 과정을 반복한다.

맺 는 말

일반화된 하트리-포크방정식을 자체모순없는 마당방법으로 풀기 위한 중심력근사를 진행하고 상관영향을 반영한 비국부항을 국부항으로 넘기는 한가지 방법을 제기하였다.

참 고 문 헌

[1] **김일성**종합대학학보 물리학, 65, 1, 124, 주체108(2019).
[2] F. Schwabl; Advanced Quantum Mechanics, 4th Edition, Springer, 41～51, 2008.
[3] M. Hjorth-Jensen; Computational Physics, University of Oslo, 485～507, 2012.

주체108(2019)년 6월 5일 원고접수

Study on the Application of Self-Consistent Field Method in Solving the Generalized Hartree-Fock Equation

Kim Yong Song, *Kim Thae Song* and *O Su Il*

We adopted the central force approximation and proposed a method to transform the non-local term reflected the correlation between nucleons into the local one to solve the generalized Hartree-Fock equation with the self-consistent field method.

Key words: Hartree-Fock approximation, many-body problem, self-consistent field method

김일성종합대학학보 주체108(2019)년
물리학 제65권 제4호

FPGA를 리용한 수자식다통로분석기에 대한 연구

홍성국, 강호, 김유철

위대한 령도자 **김정일**동지께서는 다음과 같이 교시하시였다.

《선진과학기술을 받아들이기 위한 사업을 적극적으로 벌려야 하겠습니다.》(《**김정일**선집》 증보판 제15권 499페지)

최근 ADC의 속도와 분해능이 높아지고 수자신호처리기술이 비약적으로 발전하는데 따라 직접 앞단의 임풀스신호를 받아 수자신호처리를 하여 임풀스진폭측정 및 분석을 진행하는 완전히 수자화된 분석기가 개발되였다.[3]

론문에서는 광대역고속집적회로연산증폭기와 흐름관식ADC, 론리조종 및 자료처리가 일체화된 FPGA를 리용하여 개발한 수자식다통로분석기를 고찰하였다.

1. 수자식다통로분석기의 구성방법

수자식다통로분석기는 전처리부분(예비증폭기, 완충정합단)과 방사선신호파형수자화부분(ADC, FPGA)으로 되여있다.(그림 1)

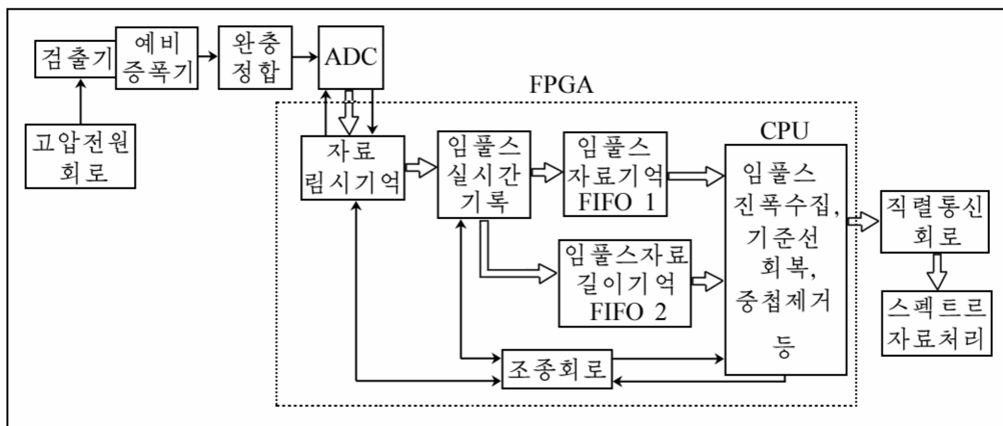


그림 1. 수자식다통로분석기구성도

수자식다통로분석기에서는 상사식다통로분석기와는 달리 전처리부분에서 간단히 증폭, 성형을 하고 기본처리(성형려파, 기준선회복, 중첩제거, 진폭수집 등)를 FPGA에서 진행한다.

ADC에서 나온 수자자료들은 FPGA의 자료림시기억단에 기억시켰다가 임풀스실시간기록단으로 들어간다. 임풀스실시간기록단의 Pipe, WriteEnable부분블로크가 결합되여 우연임풀스신호를 기록하며 LengthCounter부분블로크는 매개 임풀스표본점길이를 기록하는 기능을 수행한다. 임풀스의 진폭과 자료길이에 대한 정보를 Nios II CPU프로그람핵에 보내여 려파성형, 기준선회복, 진폭수집 등의 기능을 수행한다.

CPU의 임풀스처리속도가 실시간요구에 도달하지 못하면 임풀스자료기억 FIFO 1과 임풀스자료길이기억 FIFO 2 둘중의 하나에 쓰기충만중단이 일어나며 중단처리프로그람은 자료쓰기와 임풀스기록기능을 림시정지시킨다. CPU는 FIFO의 자료를 다 처리한 다음 임풀스기록기능을 다시 수행한다.

1）려파성형

합성성형법으로 실현한 임풀스성형구성도는 그림 2와 같다. 합성성형법을 리용하여 수자신호를 성형할 때 2개의 병렬통로를 거친다. 첫번째 통로(A)에는 프로그람조종수자지연단(d_a), 성형단(k_a 는 장성면과 하강면파라메터, m_a 는 평탄부파라메터), 곱하기회로가 있다. 두번째 통로(B)에도 동일하게 지연, 성형, 곱하기회로가 있지만 2개 통로의 응답이 차이나며 마지막신호출구는 더하기회로에서 얻는다. 지연단, 성형단에서 장성, 하강, 평탄부 및 곱하기회로의 증폭결수를 조절할수 있다.

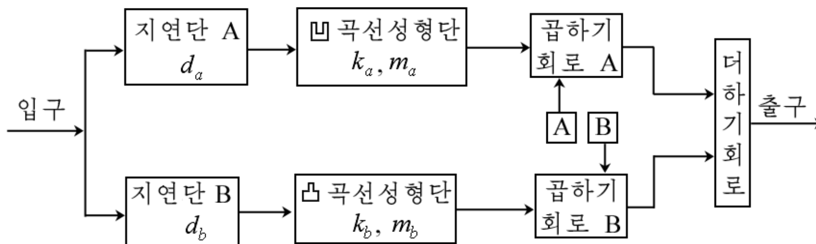


그림 2. 합성성형법으로 실현한 임풀스성형구성도

이 성형단의 출구는 오목곡률과 볼록곡률을 가지며 2개의 성형단의 응답은 장성면과 하강면에 대해 대칭으로서 k_a, k_b 로 표시한다. 평탄부는 m_a, m_b 로 표시하며 적당한 지연단 d_a, d_b 를 선택하고 각이한 장성면과 평탄부를 설정한 다음 2개의 성형기출구를 합성하여 각이한 성형출구를 얻을수 있다.

임풀스성형방법을 리용하여 다른 방법들과 비교검사를 진행하였다. 검사를 진행하기 위하여 수은접점발진기를 예비증폭기＋완충정합기＋분석기에 련결하고 고찰하려는 구역의 시작점을 성형기의 턱으로 설정하였다. 리상적인 성형기는 장치의 잡음형태에 의존한다. 고찰하려는 구역에서 $f_s = 1/T_s = 10\text{MSPS}$ 인 사다리형성형을 리용하였다.

상사식다통로분석기와 수자식다통로분석기의 출구스펙트르는 그림 3과 같다. 설정된 통로번호는 2 800이다. 수자식성형방법은 잡음억제와 탄도결손, 신호처리속도를 고려한 평

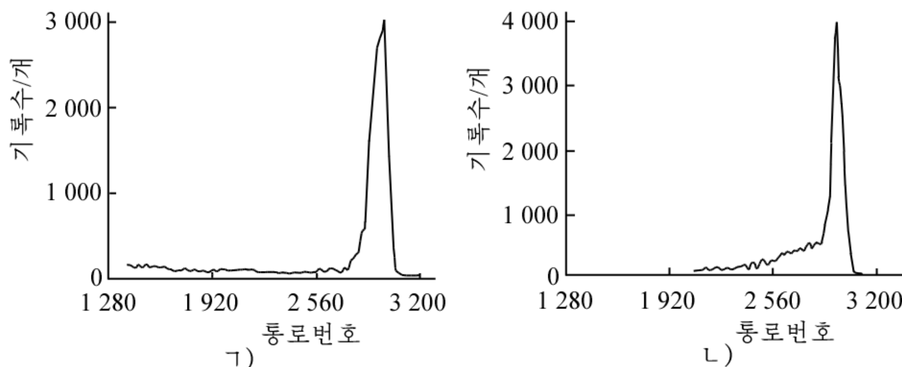


그림 3. 상사식성형방법(ㄱ))과 수자식성형방법(ㄴ))을 리용한 경우 출구스펙트르

탄부가 매우 좁은 사다리형성형방법이다. 수자식성형방법의 경우에 반폭은 6.8이고 상사식성형방법을 리용한 경우에 반폭은 9.8로서 1.5배 개선되였다.[1]

2) 기준선회복

수자식기준선회복방법은 임풀스신호표본값과 린접하고있는 기준선표본값으로부터 삽입값을 리용하는 방법으로 임풀스신호속의 기준선표본값을 구한다.(그림 4)

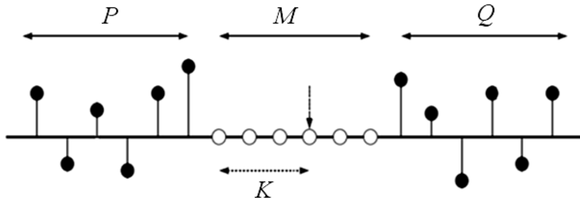


그림 4. 삽입법표시도

그림 4에서 P는 임풀스신호표본값의 앞에 있는 기준선표본값, Q는 임풀스신호표본값의 뒤에 있는 기준선표본값, M은 신호표본값개수, K는 임풀스신호속의 기준선표본값이다. 임풀스신호표본값에 대한 기준선평가는 P와 Q의 함수이며 다음과 같이 표시할수 있다.[2]

$$\hat{I}[n+K]=\sum_{i=0}^{P-1}\alpha_i I[n-i]+\sum_{j=0}^{Q-1}\beta_j I[n+j+M+1] \tag{1}$$

여기서 α와 β값을 구하여 임풀스신호의 영향을 려파제거할수 있다. 이때 출구는 다음과 같이 변화된다.

$$I[n]=B[n]+\overline{B} \tag{2}$$

P와 Q의 값이 클수록 삽입값계산결과가 더 정확하다. P와 Q의 최대값과 신호임풀스의 계수속도, 수자신호표본화주파수는 서로 련관되여있다.

분할법과 삽입법을 리용한 기준선평가결과는 그림 5와 같다. 삽입법에서는 포물선려파기를 리용하고 임풀스주위의 20개의 표본점들에 대해 삽입과정을 전개하였다.($P=Q=0$)

이 방법의 우점은 온도에 따르는 증폭기의 편의점변화 또는 극령보상의 질이 높지 못한데로부터 생기는 기준선표류를 제거하기 위해 2차적으로 기준선회복기를 리용할 필요가 없는것이다. 다음으로 기준선측정을 임풀스가 나타날 때 진행하므로 기준선평가값이 항상 정확하며 알고리듬을 리용하면 기준선측정과정에 기준선평균값을 자유롭게 변화시킬수 있다.

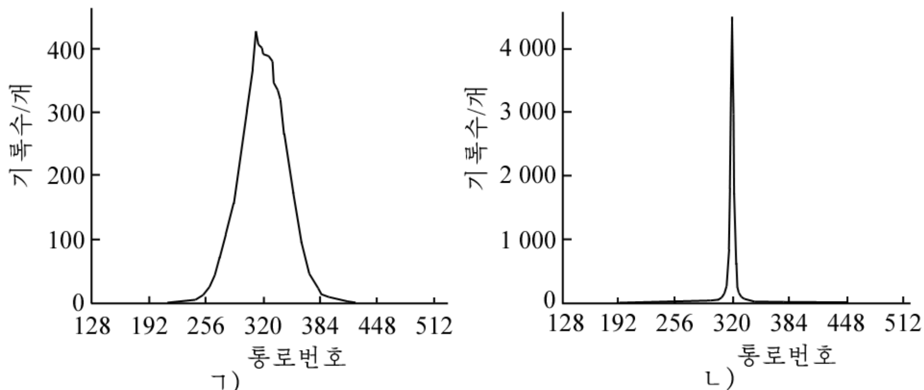


그림 5. 분할법(ㄱ))과 삽입법(ㄴ))을 리용한 기준선평가결과

그림 5에서 보는바와 같이 삽입법은 분할법과 비교할 때 반폭이 7.8배 개선되였다.

3) 진폭수집

진폭수집방법에서는 표본값크기를 직접 비교하는 방법으로 임풀스진폭의 최대값을 얻는다. 측정임풀스진폭값은 리산화된 표본값들이므로 실지임풀스진폭의 최대값에 대응하는 시간과 측정임풀스진폭의 최대값에 대응하는 시간은 서로 차이난다. 따라서 이 두 값을 최대로 접근시켜 진폭의 정확도를 높인다.

임풀스겹침식별은 봉우리부분겹침인 경우에 두 신호를 모두 제거하고 꼬리부분겹침인 경우에 계수률교정방법으로 진행하였다.[3]

계수률교정방법을 수자신호처리기에서 간단히 실현할수 있으며 체계의 불감시간과 겹침제거에 의한 계수률손실을 교정할수 있게 한다.

개발한 수자식다통로분석기의 기본특성량들은 진폭변환비트수 8～14bit, 표본화속도 최대 40MSPS, 미분비선형성오차 ±0.07%이하, 적분비선형성오차 ±0.1%이하, 신호대잡음비 73dB, 장시간안정성 ±0.1%이다.

2. 수자식다통로분석기를 리용한 ^{60}Co 원천의 γ선에네르기스펙트르측정

수자식다통로분석기의 특성을 확증하기 위하여 섬광검출기 NaI(Tl)를 리용하여 표준 γ선원천 ^{60}Co에 대해 측정을 진행하였다.(그림 6) 그림 6에서 보는바와 같이 스펙트르의 마지막에 있는 2개의 큰 봉우리(1.17, 1.33MeV)는 빛전자흡수와 다중산란 즉 γ선의 에네르기가 완전히 흡수된 결과에 생긴것이다.

대부분의 동위원소에 대하여 역산란봉우리에 해당하는 에네르기는 70～400keV에 놓인다. 이밖에 전자의 루실현상과 X선이 스펙트르모양에 보충적인 영향을 준다.(경계효과) 측정한 에네르기스펙트르자료들은 선행연구자료[1]들과 잘 일치하였다.

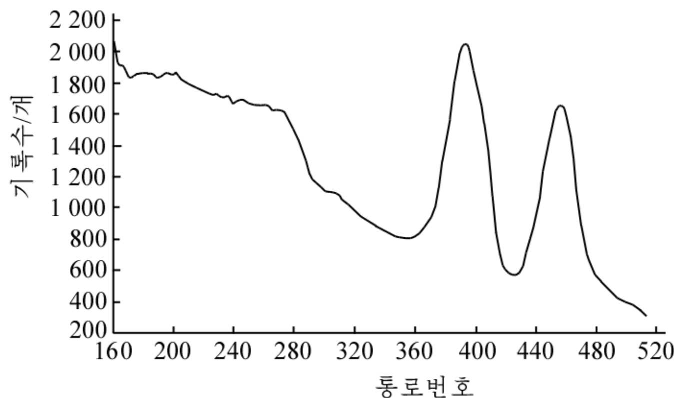


그림 6. 섬광검출기 NaI(Tl)를 리용하여 측정한 ^{60}Co 원천의 γ선에네르기스펙트르

맺 는 말

잡음억제와 탄도결손, 신호처리속도를 고려한 평탄부가 매우 좁은 사다리형성형방법은 상사식성형방법과 비교할 때 반폭이 1.5배 개선되였다. 기준선회복법은 리론적으로 기준선회복을 실현하는 제일 좋은 방법으로서 분할법과 비교할 때 반폭이 7.8배 개선되였다.

참 고 문 헌

[1] **김일성**종합대학학보 물리학, 64, 3, 131, 주체107(2018).
[2] **김일성**종합대학학보 물리학, 64, 1, 132, 주체107(2018).
[3] Y. Moline et al.; IEEE Transactions on Nuclear Science, 62, 2, 480, 2015.

주체108(2019)년 6월 5일 원고접수

Study on the Digital Multichannel Analyzer Using FPGA Device

Hong Song Guk, *Kang Ho* and *Kim Yu Chol*

As a result of applying the digital trapezoidal shaping of which the width of the flat-top was very narrow with considering the effects on noise suppression, ballistic deficit and signal processing rate, half width was improved by 1.5 times above the analog shaping's. Our applied baseline restoration method, being extremely good at baseline restoration theoretically, has improved in energy resolution by 7.8 times as compared with the shared baseline method.

Key words: trapezoidal shaping, baseline restoration

김일성종합대학학보 주체108(2019)년
물리학 제65권 제4호

해석정밀형삽입원자방법에 의한 체심립방구조 Fe-X 2원합금들의 형성엔탈피와 희석열계산

허성남, 진학선

해석수정형삽입원자방법에서 미해명문제로 남아있던 Ag, Au, Cu의 구조안정성문제와 1개 원자가 차지하는 체적이 일정한 조건에서 체심립방, 면심립방, 조밀륙방구조들에서의 결합에네르기차의 계산결과와 실험결과와의 일치성을 훨씬 높일수 있는 해석정밀형삽입원자방법[2－4]이 제기되였다. 그러나 체심립방구조의 합금재료의 형성엔탈피 및 희석열계산에 해석정밀형삽입원자방법을 적용한 연구자료는 제기된것이 없다.

론문에서는 체심립방구조의 Fe-X 2원합금의 형성엔탈피와 희석열을 계산하기 위하여 2체포텐샬과 전자밀도분포함수[2]의 절단반경들을 고려한 계산공식들을 유도하고 그 정확성을 검증하였다.

리론 및 방법

체심립방금속에 대한 해석수정형삽입원자방법에서 2체포텐샬의 형식은 다음과 같다.[2]

$$\phi(r)=\begin{cases}\sum_{j=-1}^{4}k_j\left(\frac{r}{r_1}\right)^j & (r\le r_2)\\ \sum_{j=0}^{7}l_j\left(\frac{r}{r_2}-1\right)^j & (r_2<r\le r_c)\\ 0 & (r>r_c)\end{cases} \tag{1}$$

여기서 $r_i(i=1,\ 2,\cdots)$는 가장 안정한 평형상태의 체심립방결정에서의 i번째 린접거리를 표시한다.

합금포텐샬형식은 다음과 같다.[5]

$$\phi^{\mathrm{ab}}(r)=[\phi^{\mathrm{a}}(r)f^{\mathrm{b}}(r)/f^{\mathrm{a}}(r)+\phi^{\mathrm{b}}(r)f^{\mathrm{a}}(r)/f^{\mathrm{b}}(r)]/2 \tag{2}$$

여기서 첨자 a와 b는 서로 다른 종류의 합금원소들을 의미한다. 전자밀도함수 $f^{\mathrm{a}}(r)$와 $f^{\mathrm{b}}(r)$에 들어가는 전자밀도파라메터 f_e^{a}와 f_e^{b}는 $f_e=[(E_c-E_{1f})/\Omega]^{3/5}$으로, 체심립방－체심립방 2원합금의 살창상수는 $a=(1-x)a^{\mathrm{a}}+xa^{\mathrm{b}}$에 의하여 결정한다.[1] a^{a}, a^{b}는 각각 가장 안정한 평형상태에서 합금원소 a로만 이루어진 체심립방결정과 b로만 이루어진 체심립방결정의 살창상수이다.

해석수정형삽입원자방법포텐샬을 리용하여 체심립방－체심립방 2원합금의 형성엔탈피를 계산하는 공식은 다음과 같다.

$$\Delta H = \left[E_c^{\mathrm{a}} + \frac{1}{2}\Phi^{\mathrm{a}} + F^{\mathrm{a}}(\rho) + M^{\mathrm{a}}(P)\right](1-x) + \left[E_c^{\mathrm{b}} + \frac{1}{2}\Phi^{\mathrm{b}} + F^{\mathrm{b}}(\rho) + M^{\mathrm{b}}(P)\right]x \tag{3}$$

여기서 $\rho = (1-x)\rho^{\mathrm{a}} + x\rho^{\mathrm{b}}$, $P = (1-x)P^{\mathrm{a}} + xP^{\mathrm{b}}$이며 체심립방금속에 대한 개선된 해석수정형삽입원자방법포텐샬에서 전자밀도함수의 절단반경을 $r_{cf} = r_5 + 0.75(r_6 - r_5)$로 설정한것을 고려하면 ρ^{a}, ρ^{b}, P^{a}, P^{b}에 대한 식을 유도한 결과는 다음과 같다.

$$\begin{aligned}
\rho^{\mathrm{a}} &= N_1 f^{\mathrm{a}}(r_1) + N_2 f^{\mathrm{a}}(r_2) + N_3 f^{\mathrm{a}}(r_3) + N_4 f^{\mathrm{a}}(r_4) + N_5 f^{\mathrm{a}}(r_5)\\
P^{\mathrm{a}} &= N_1[f^{\mathrm{a}}(r_1)]^2 + N_2[f^{\mathrm{a}}(r_2)]^2 + N_3[f^{\mathrm{a}}(r_3)]^2 + N_4[f^{\mathrm{a}}(r_4)]^2 + N_5[f^{\mathrm{a}}(r_5)]^2\\
\rho^{\mathrm{b}} &= N_1 f^{\mathrm{b}}(r_1) + N_2 f^{\mathrm{b}}(r_2) + N_3 f^{\mathrm{b}}(r_3) + N_4 f^{\mathrm{b}}(r_4) + N_5 f^{\mathrm{b}}(r_5)\\
P^{\mathrm{b}} &= N_1[f^{\mathrm{b}}(r_1)]^2 + N_2[f^{\mathrm{b}}(r_2)]^2 + N_3[f^{\mathrm{b}}(r_3)]^2 + N_4[f^{\mathrm{b}}(r_4)]^2 + N_5[f^{\mathrm{b}}(r_5)]^2
\end{aligned} \tag{4}$$

여기서 $N_i(i=1, 2, \cdots, 5)$는 체심립방결정에서 제 i 번째 린접원자수로서 각각 8, 6, 12, 24, 8이다.

희석열계산에서는 4가지 요인에 의한 에네르기변화량을 고려한다. 체심립방금속에 대한 개선된 해석수정형삽입원자방법포텐샬에서 2체포텐샬의 절단반경을 $r_c = r_2 + 0.6(r_3 - r_2)$로 설정하였으므로 용매금속 a에서 원자 하나를 이동시키는것으로 하여 생기는 에네르기변화량은 다음과 같다.

$$E_1 = -F^{\mathrm{a}}(\rho_e^{\mathrm{a}}) - N_1\phi^{\mathrm{a}}(r_1^{\mathrm{a}}) - N_2\phi^{\mathrm{a}}(r_2^{\mathrm{a}}) \tag{5}$$

여기서 ρ_e^{a}는 가장 안정한 평형상태에서의 용매금속 a에서 살창원자위치에서의 전자밀도이며 용매금속 a에 1개의 용질원자 b를 삽입하는것으로 하여 생기는 에네르기변화량은 다음과 같다.

$$E_2 = F^{\mathrm{b}}(\rho_e^{\mathrm{a}}) + N_1\phi^{\mathrm{ab}}(r_1^{\mathrm{a}}) + N_2\phi^{\mathrm{ab}}(r_2^{\mathrm{a}}) \tag{6}$$

체심립방금속에 대한 개선된 해석수정형삽입원자방법포텐샬에서 설정된 전자밀도함수의 절단반경을 고려하면 용매금속 a에서 원자 하나가 용질원자 b로 교체된 후 주위원자들에서 전자밀도분포의 변화로 생기는 에네르기변화량은 다음과 같다.

$$\begin{aligned}
E_3 = &-(N_1 + N_2 + N_3 + N_4 + N_5)F^{\mathrm{a}}(\rho_e^{\mathrm{a}}) + N_1[F^{\mathrm{a}}(\rho_1) + M^{\mathrm{a}}(P_1)] +\\
&+ N_2[F^{\mathrm{a}}(\rho_2) + M^{\mathrm{a}}(P_2)] + N_3[F^{\mathrm{a}}(\rho_3) + M^{\mathrm{a}}(P_3)] +\\
&+ N_4[F^{\mathrm{a}}(\rho_4) + M^{\mathrm{a}}(P_4)] + N_5[F^{\mathrm{a}}(\rho_5) + M^{\mathrm{a}}(P_5)]
\end{aligned} \tag{7}$$

여기서 $\rho_i(i=1\sim5)$와 $P_i(i=1\sim5)$는 다음과 같다.

$$\begin{aligned}
\rho_1 &= (N_1-1)f^{\mathrm{a}}(r_1^{\mathrm{a}}) + N_2 f^{\mathrm{a}}(r_2^{\mathrm{a}}) + N_3 f^{\mathrm{a}}(r_3^{\mathrm{a}}) + N_4 f^{\mathrm{a}}(r_4^{\mathrm{a}}) + N_5 f^{\mathrm{a}}(r_5^{\mathrm{a}}) + f^{\mathrm{b}}(r_1^{\mathrm{a}})\\
P_1 &= (N_1-1)[f^{\mathrm{a}}(r_1^{\mathrm{a}})]^2 + N_2[f^{\mathrm{a}}(r_2^{\mathrm{a}})]^2 + N_3[f^{\mathrm{a}}(r_3^{\mathrm{a}})]^2 + N_4[f^{\mathrm{a}}(r_4^{\mathrm{a}})]^2 + N_5[f^{\mathrm{a}}(r_5^{\mathrm{a}})]^2 + [f^{\mathrm{b}}(r_1^{\mathrm{a}})]^2\\
\rho_2 &= N_1 f^{\mathrm{a}}(r_1^{\mathrm{a}}) + (N_2-1)f^{\mathrm{a}}(r_2^{\mathrm{a}}) + N_3 f^{\mathrm{a}}(r_3^{\mathrm{a}}) + N_4 f^{\mathrm{a}}(r_4^{\mathrm{a}}) + N_5 f^{\mathrm{a}}(r_5^{\mathrm{a}}) + f^{\mathrm{b}}(r_2^{\mathrm{a}})\\
P_2 &= N_1[f^{\mathrm{a}}(r_1^{\mathrm{a}})]^2 + (N_2-1)[f^{\mathrm{a}}(r_2^{\mathrm{a}})]^2 + N_3[f^{\mathrm{a}}(r_3^{\mathrm{a}})]^2 + N_4[f^{\mathrm{a}}(r_4^{\mathrm{a}})]^2 + N_5[f^{\mathrm{a}}(r_5^{\mathrm{a}})]^2 + [f^{\mathrm{b}}(r_2^{\mathrm{a}})]^2\\
\rho_3 &= N_1 f^{\mathrm{a}}(r_1^{\mathrm{a}}) + N_2 f^{\mathrm{a}}(r_2^{\mathrm{a}}) + (N_3-1)f^{\mathrm{a}}(r_3^{\mathrm{a}}) + N_4 f^{\mathrm{a}}(r_4^{\mathrm{a}}) + N_5 f^{\mathrm{a}}(r_5^{\mathrm{a}}) + f^{\mathrm{b}}(r_3^{\mathrm{a}})\\
P_3 &= N_1[f^{\mathrm{a}}(r_1^{\mathrm{a}})]^2 + N_2[f^{\mathrm{a}}(r_2^{\mathrm{a}})]^2 + (N_3-1)[f^{\mathrm{a}}(r_3^{\mathrm{a}})]^2 + N_4[f^{\mathrm{a}}(r_4^{\mathrm{a}})]^2 + N_5[f^{\mathrm{a}}(r_5^{\mathrm{a}})]^2 + [f^{\mathrm{b}}(r_3^{\mathrm{a}})]^2\\
\rho_4 &= N_1 f^{\mathrm{a}}(r_1^{\mathrm{a}}) + N_2 f^{\mathrm{a}}(r_2^{\mathrm{a}}) + N_3 f^{\mathrm{a}}(r_3^{\mathrm{a}}) + (N_4-1)f^{\mathrm{a}}(r_4^{\mathrm{a}}) + N_5 f^{\mathrm{a}}(r_5^{\mathrm{a}}) + f^{\mathrm{b}}(r_4^{\mathrm{a}})\\
P_4 &= N_1[f^{\mathrm{a}}(r_1^{\mathrm{a}})]^2 + N_2[f^{\mathrm{a}}(r_2^{\mathrm{a}})]^2 + N_3[f^{\mathrm{a}}(r_3^{\mathrm{a}})]^2 + (N_4-1)[f^{\mathrm{a}}(r_4^{\mathrm{a}})]^2 + N_5[f^{\mathrm{a}}(r_5^{\mathrm{a}})]^2 + [f^{\mathrm{b}}(r_4^{\mathrm{a}})]^2\\
\rho_5 &= N_1 f^{\mathrm{a}}(r_1^{\mathrm{a}}) + N_2 f^{\mathrm{a}}(r_2^{\mathrm{a}}) + N_3 f^{\mathrm{a}}(r_3^{\mathrm{a}}) + N_4 f^{\mathrm{a}}(r_4^{\mathrm{a}}) + (N_5-1)f^{\mathrm{a}}(r_5^{\mathrm{a}}) + f^{\mathrm{b}}(r_5^{\mathrm{a}})\\
P_5 &= N_1[f^{\mathrm{a}}(r_1^{\mathrm{a}})]^2 + N_2[f^{\mathrm{a}}(r_2^{\mathrm{a}})]^2 + N_3[f^{\mathrm{a}}(r_3^{\mathrm{a}})]^2 + N_4[f^{\mathrm{a}}(r_4^{\mathrm{a}})]^2 + (N_5-1)[f^{\mathrm{a}}(r_5^{\mathrm{a}})]^2 + [f^{\mathrm{b}}(r_5^{\mathrm{a}})]^2
\end{aligned} \tag{8}$$

a원자를 b원자로 교체하는것으로 하여 생기는 결합에네르기변화량은 다음과 같다.

$$E_4 = -E_c^{\mathrm{a}} + E_c^{\mathrm{b}} \tag{9}$$

따라서 총에네르기변화량 즉 희석열은 E_1, E_2, E_3, E_4들의 합으로 된다.

결과 및 분석

6종의 체심립방－체심립방 2원합금들에 대한 합금원소의 몰분률에 따르는 형성엔탈피계산결과는 그림과 같다.

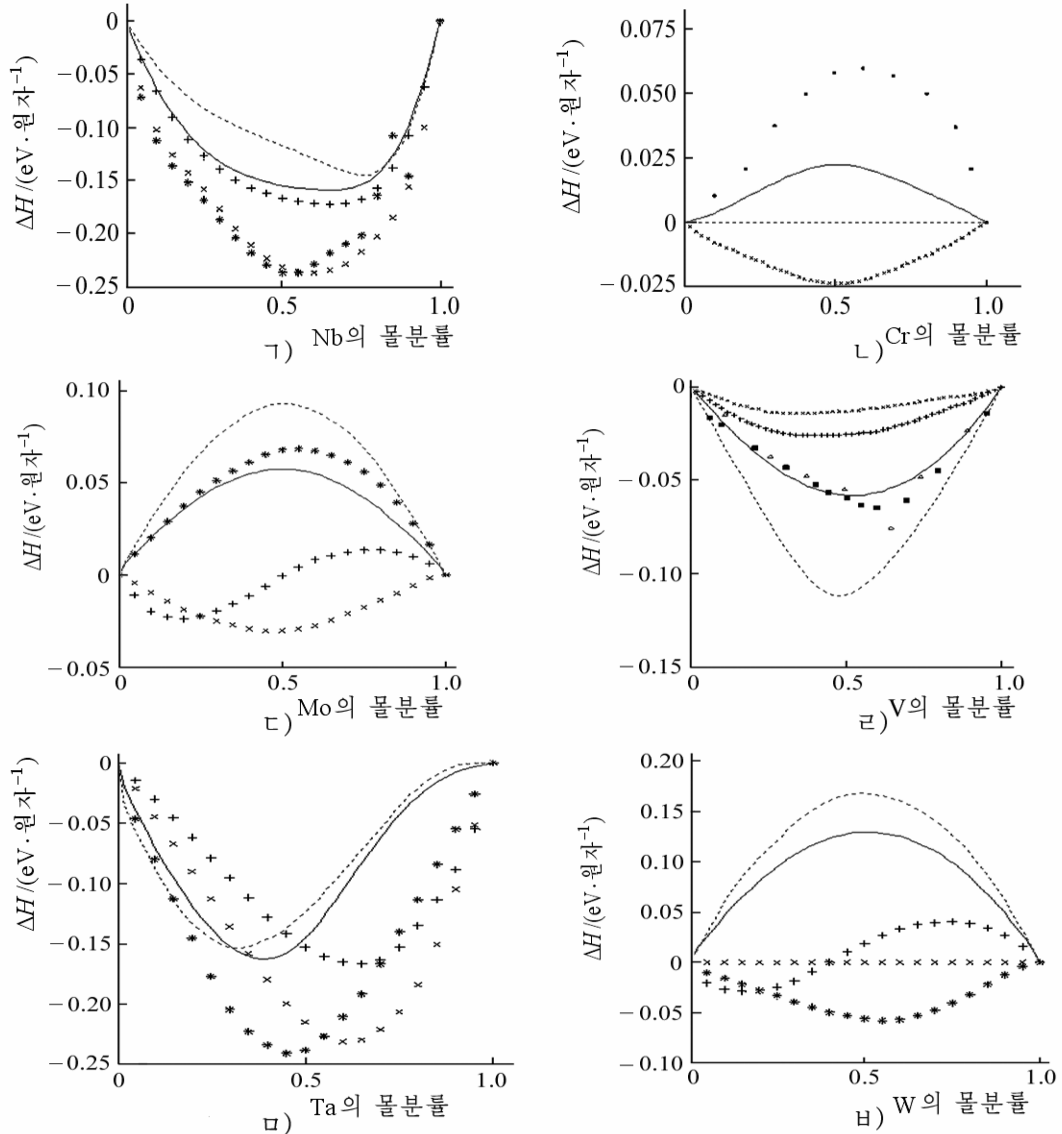


그림. 6종의 체심립방－체심립방 2원합금들에 대한 합금원소의
몰분률에 따르는 형성엔탈피계산결과

실선은 계산결과, 점선은 해석수정형삽입원자방법계산결과, +는 초기 해석수정형 삽입원자방법계산결과, ×는 미에데마리론계산결과, △는 Spencer의 1원리계산결과, □는 Sigli의 1원리계산결과, ■는 실험결과, *는 해석형삽입원자방법계산결과[1]

그림에 6종의 체심립방—체심립방 2원합금들에 대하여 합금원소의 몰분률에 따르는 형성엔탈피계산결과를 실험결과 및 선행계산결과[1]들과 함께 주었다. 선행계산결과들에는 해석수정형삽입원자방법, 해석형삽입원자방법, 미에데마리론계산결과들이 포함된다. 그림으로부터 Fe-Ta, Fe-V, Fe-W합금들에 대한 계산결과는 실험결과와 아주 잘 일치하며 1원리계산결과와 미에데마리론계산결과와도 기본적으로 일치한다는것을 알수 있다. 이 3개의 합금들에서는 합금원소들의 전기음성도와 원자반경이 비슷한것으로 하여 균일한 고용체를 이루게 되며 탄성변형도 무시할수 있다. 이런 합금들에 대하여 계산결과들이 실험결과 및 1원리, 미에데마리론계산결과들과 일치하는것은 계산결과의 정확성을 검증하는것으로 된다.

Fe-Cr, Fe-Mo, Fe-Nb합금들에 대한 계산결과들은 선행계산결과들에 비하여 실험결과와의 일치정도가 개선되였다. 이것은 개선된 해석수정형삽입원자방법을 여러 몰분률을 가진 체심립방—체심립방 2원합금들의 연구에 효과적으로 리용할수 있다는것을 보여준다.

6종의 Fe-X 2원합금들의 희석열을 계산한 결과는 표와 같다. 표에는 선행계산결과 및 실험결과[1]와 함께 주었다. 선행계산결과들에는 해석수정형삽입원자방법, 해석형삽입원자방법, 미에데마리론계산결과들이 포함된다.

표. 6종의 Fe-X 2원합금들의 희석열을 계산한 결과

용질	Cr	Mo	Nb	Ta	V	W
	0.13	0.12	−0.77	−0.66	−0.17	0.16
	0	0.31	−0.97	−0.64	−0.11	0.60
용매(Fe)	—	0.03	−1.67	−1.69	−0.15	−0.56
	−0.06	−0.09	−0.70	−0.67	−0.29	0
	0.22	—	—	—	−0.16	—

첫 행은 계산결과, 둘째 행은 해석수정형삽입원자방법계산결과, 셋째 행은 해석형삽입원자방법계산결과, 넷째 행은 미에데마리론계산결과, 다섯째 행은 실험결과[1]이다.

표로부터 Fe-Nb, Fe-Ta, Fe-V의 계산결과들은 미에데마리론계산결과와 아주 잘 일치하며 Fe-Cr, Fe-Mo, Fe-W의 결과는 미에데마리론계산결과와 거의 일치한다는것을 알수 있다. 체심립방구조의 Fe-X 2원합금의 형성엔탈피 및 희석열계산에 리용된 모든 실험결과들과의 일치정도가 여러 방법의 계산결과들중에서 제일 높다.

맺 는 말

연구결과들은 개선되기 전의 해석형 및 해석수정형삽입원자방법들에 비하여 더 정확한 결과를 주며 이것은 체심립방금속들에 대한 해석정밀형삽입원자방법이 합금재료의 연구에 효과적으로 적용될수 있다는것을 보여준다.

참 고 문 헌

[1] B. Zhang et al.; Theory of Embedded Atom Method and its Application to Materials Science-Atomic Scale Materials Design Theory, Hunan University, 291～332, 2003.
[2] H. Jin et al.; Appl. Phys., A 120, 189, 2015.
[3] H. Jin et al.; Appl. Phys., A 123, 257, 2017.
[4] C. Jon et al.; Radiat. Eff. Defects Solids, 172, 575, 2017.
[5] F. Fang et al.; Mater. Sci. Eng., A 355, 357, 2003.

주체108(2019)년 6월 5일 원고접수

Calculation of Formation Enthalpies and Dilution Heats of Fe-X Binary Alloys for BCC Structure by Precise Analytic Embedded Atom Method Potentials

Ho Song Nam, *Jin Hak Son*

We applied the precise analytic embedded atom method potentials for BCC metals to the calculation of the formation enthalpies and the dilution heats of Fe-X(X=Cr, Mo, Nb, Ta, V, W) binary alloys for BCC structure. The present results are mainly in agreement with the experimental data and the results calculated with Miedema theory. The results more approached to the experimental data than the modified analytic EAM results.

Key words: embedded atom method(EAM), formation enthalpy, dilution heat

매듭그린함수법과 단일관로모형에 의한 가압경수로의 로심동특성계산

서철, 장영원, 허일문

경애하는 최고령도자 **김정은**동지께서는 다음과 같이 말씀하시였다.

《수력을 위주로 하면서 화력에 의한 전력생산을 합리적으로 배합하고 원자력발전의 비중을 높이며 다양한 자연에네르기원천을 적극 리용하여 국가적인 에네르기수요를 자체로 충족시켜야 합니다.》

원자로로심에서의 빠른 과도과정을 정확히 예측하는것은 원자로의 설계와 과학적인 관리운영에서 중요한 의의를 가지므로 이에 대한 연구[1－4]가 활발히 진행되고있다.

론문에서는 노이만경계조건을 가진 매듭그린함수법과 단일관로모형에 기초하여 가압경수로의 3차원로심동특성을 해석하는 수치계산체계를 확립하고 정확성을 검증하였다.

1. 노이만경계조건을 가진 매듭그린함수법의 기본방정식계

비정상문제에 관한 노이만경계조건을 가진 매듭그린함수법의 기본방정식계에서 시간미분에 대하여 음계차근사를 실시하면 가로적분묶음의 전개결수에 관한 방정식과 정미중성자흐름결합방정식, 매듭평형방정식, 지연중성자선행핵에 관한 방정식은 각각 다음과 같다.

$$\left\{[A_u]^k + \frac{1}{\upsilon_g \Delta t}[G_{gu}^{uu,\, t_{j+1}}]^k\right\}\boldsymbol{\Phi}_{gu}^k(t_{j+1}) = [G_{gu}^{uu,\, t_{j+1}}]^k[\boldsymbol{Q}_{gu}^k(t_{j+1}) - \boldsymbol{L}_{gu}^k(t_{j+1})] - \\ -[\boldsymbol{G}_{gu}^{u+,\, t_{j+1}}]^k J_{gu}^k(a_u^k,\ t_{j+1}) + [\boldsymbol{G}_{gu}^{u-,\, t_{j+1}}]^k J_{gu}^k(-a_u^k,\ t_{j+1}) + \frac{1}{\upsilon_g \Delta t}[G_{gu}^{uu,\, t_{j+1}}]^k \boldsymbol{\Phi}_{gu}^k(t_j) \tag{1}$$

$$f_{gu+}^{k,\, t_{j+1}} T_{gu}^{k,\, t_{j+1}} J_{gu}^{k-1}(a_u^{k-1},\ t_{j+1}) - (f_{gu+}^{k,\, t_{j+1}} R_{gu}^{k,\, t_{j+1}} + f_{gu-}^{k+1,\, t_{j+1}} R_{gu}^{k+1,\, t_{j+1}}) J_{gu}^k(a_u^k,\ t_{j+1}) + \\ + f_{gu-}^{k+1,\, t_{j+1}} T_{gu}^{k+1,\, t_{j+1}} J_{gu}^{k+1}(a_u^{k+1},\ t_{j+1}) = \\ = f_{gu-}^{k+1,\, t_{j+1}} \sum_{n=0}^{2}\left[-\frac{1}{\upsilon_g \Delta t}\Phi_{gun}^k(t_{j+1}) + Q_{gun}^k(t_{j+1}) - L_{gun}^k(t_{j+1})\right][G_{gu}^{u-}]_n^{k+1,\, t_{j+1}} + \\ + f_{gu-}^{k+1,\, t_{j+1}} \sum_{n=0}^{2}\frac{1}{\upsilon_g \Delta t}\Phi_{gun}^k(t_j)[G_{gu}^{u-}]_n^{k+1,\, t_{j+1}} - f_{gu+}^{k,\, t_{j+1}} \sum_{n=0}^{2}\frac{1}{\upsilon_g \Delta t}\Phi_{gun}^k(t_j)[G_{gu}^{u+}]_n^{k,\, t_{j+1}} - \\ - f_{gu+}^{k,\, t_{j+1}} \sum_{n=0}^{2}\left[-\frac{1}{\upsilon_g \Delta t}\Phi_{gun}^k(t_{j+1}) + Q_{gun}^k(t_{j+1}) - L_{gun}^k(t_{j+1})\right][G_{gu}^{u+}]_n^{k,\, t_{j+1}} \tag{2}$$

$$\sum_{u=x,\, y,\, z}\frac{1}{2a_u^k}[J_{gu}^k(a_u^k,\ t_{j+1}) - J_{gu}^k(-a_u^k,\ t_{j+1})] + \left[\Sigma_{t,\, g}^k(t_{j+1}) + \frac{1}{\upsilon_g \Delta t}\right]\overline{\Phi}_g^k(t_{j+1}) = \frac{1}{\upsilon_g \Delta t}\overline{\Phi}_g^k(t_j) + \overline{Q}_g^k(t_{j+1}) \tag{3}$$

$$C_{iu}^k(t_{j+1}) = \frac{\beta_i}{\lambda_i}\left\{\left[1 - \frac{1-\exp(-\lambda_i \Delta t)}{\lambda_i \Delta t}\right]\sum_{g=1}^{G}(\nu\Sigma_f)_{fg}^k(t_{j+1})\boldsymbol{\Phi}_{gu}^k(t_{j+1}) + \right.$$
$$\left. + \left[\frac{1-\exp(-\lambda_i \Delta t)}{\lambda_i \Delta t} - \exp(-\lambda_i \Delta t)\right]\sum_{g=1}^{G}(\nu\Sigma_f)_{fg}^k(t_j)\boldsymbol{\Phi}_{gu}^k(t_j)\right\} + C_{iu}^k(t_j)\exp(-\lambda_i \Delta t) \quad (4)$$

식 (1)－(4)는 중성자의 공간동특성해석을 위한 닫긴 방정식계를 이룬다.

2. 단일관로모형에 의한 열수력동특성계산모형

열수력동특성계산에서 1개의 연료집합체를 연료심과 외피, 랭각재(감속재)로 구성된 하나의 평균화된 원기둥관로로 등가시키는 단일관로모형을 적용하였다. 또한 랭각재를 비압축성단상류체로 보고 관로들사이의 가로흐름은 없다고 가정하였다.

1) 연료봉에서 반경방향온도분포계산

연료봉은 반경방향에서 연료심과 간극, 외피의 3개 층으로 구성된다.

연료심에서 반경방향의 비정상열전도방정식과 그 경계조건은 다음과 같다.

$$\rho_f C_f(r,\ t)\frac{\partial T_f(r,\ t)}{\partial t} = \frac{1}{r}\cdot\frac{\partial}{\partial r}\left[\lambda_f(r,\ t) r \frac{\partial T_f(r,\ t)}{\partial r}\right] + q_v(t) \quad (5)$$

$$\left.\frac{\partial T_f}{\partial r}\right|_{r=0} = 0 \quad (6)$$

$$-\lambda_f \left.\frac{\partial T_f}{\partial r}\right|_{r=r_f} = h_g(T_{f,\,s} - T_{c,\,in}) \quad (7)$$

여기서 T_f, ρ_f, λ_f, C_f, q_v, r_f, $T_{f,\,s}$, h_g, $T_{c,\,in}$은 각각 연료심의 온도, 밀도, 열전도도, 비열, 발열밀도, 반경, 연료심바깥겉면온도, 연료심과 외피사이의 열전달결수, 외피아낙겉면온도이다. 류사한 방법으로 연료봉외피에 대한 방정식을 얻는다. 이 방정식들을 반경방향요소구역에서 적분하고 공간미분을 계차비로 넘긴다. 그리고 시간미분에 관하여 음계차근사를 실시하여 수치계산을 위한 방정식을 얻는다.

2) 랭각재의 축방향온도분포계산

관로에서 랭각재의 에네르기보존방정식은 다음과 같다.

$$\frac{\partial T_m(z,\ t)}{\partial t} + w(z,\ t)\frac{\partial T_m(z,\ t)}{\partial z} = \frac{f_m q_l(z,\ t) + 2\pi r_{c,\,out} h_m(z,\ t)[T_{c,\,out}(z,\ t) - T_m(z,\ t)]}{\rho_m(z,\ t) C_m(z,\ t) A_m} \quad (8)$$

여기서 w, ρ_m, C_m, A_m, q_l, f_m, T_m, h_m은 각각 랭각재의 흐름속도, 밀도, 비열, 랭각통로자름면적, 통로의 선출력밀도, 랭각재에서의 출력방출몫, 랭각재의 온도, 열전달결수이다. 그리고 $r_{c,\,out}$와 $T_{c,\,out}$는 각각 외피의 바깥반경과 바깥겉면온도이다.

식 (8)에서 공간미분에 관하여 중심계차, 시간미분에 관하여 음계차근사를 실시하면 수치풀이를 위한 방정식이 얻어진다.

3. 3차원로심공간동특성계산결과

계산모형을 검증하기 위하여 가압경수로의 3차원로심과도과정에 대한 기준문제 NEACRP-L-335의 결과[5]와 비교하였다. 이 기준문제는 초기에 림계상태에 있던 로심으로부터 조종봉집합체가 탈출할 때 일어나는 사고정황을 분석한것이다. 여기에는 조종봉들의 배치와 섭동위치, 출력준위에 따라 6가지 문제(A1, A2, B1, B2, C1, C2)가 있다.

A2, B2문제에 관하여 정상상태(정격출력 2 775MW)와 과도과정의 몇가지 주목하는 량들에 대한 계산결과는 표 1, 2와 같다. 표에서 보는바와 같이 정상상태에서 림계붕소농도와 연료봉중심최대온도, 조종봉인출반응도를 비롯한 파라메터의 계산결과가 기준값과 잘 일치한다. 과도상태인 경우 B2문제의 최대출력도달시간이 얼마간 차이난다.

표 1. A2와 B2문제에 대한 정상상태의 계산결과

문제	구분	림계붕소농도 /(·10^{-4}%)	출력불균일결수	연료봉중심 최대온도/℃	연료평균 온도/℃	조종봉탈출 반응도/(·10^{-3}%)
A2	기준값	1 160.6	2.221	1 671.9	541.6	89.5
	계산값	1 161.8	2.166	1 679.1	552.3	90.9
B2	기준값	1 189.4	2.109	1 576.6	543.7	99.1
	계산값	1 187.0	2.028	1 576.0	550.5	99.2

표 2. A2와 B2문제에 대한 과도과정의 계산결과

문제	구분	상대 출력	최대출력 도달시간/s	5s후 연료봉중심 최대온도/℃	5s후 연료 평균온도/℃	5s후 랭각재출구 평균온도/℃	5s후 상대출력
A2	기준값	1.080	0.1	1 691.8	554.6	324.6	1.035
	계산값	1.089	0.1	1 703.9	557.5	325.2	1.033
B2	기준값	1.063	0.12	1 588.1	552.0	324.7	1.038
	계산값	1.080	0.09	1 593.5	556.8	325.5	1.044

A2문제에서 $t=0$s (정상상태)와 $t=0.1$s 일 때 z축에 관하여 평균한 규격화된 출력분포는 그림과 같다. 그림에서 보는바와 같이 정상상태에서 조종봉이 삽입되여있던 로심중심위치의 출력준위가 주변에 비하여 현저히 낮았으나 조종봉인출후에는 주변과 대등한 준위로 높아졌다.

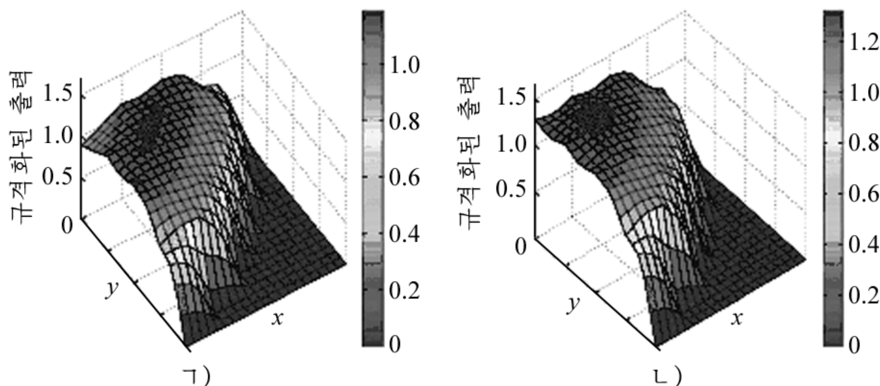


그림. A2문제에서 규격화된 출력분포
ㄱ) $t=0$s (정상상태), ㄴ) $t=0.1$s

맺 는 말

노이만경계조건을 가진 매듭그린함수법에 의한 3차원중성자동특성방정식의 구체적인 수치풀이모형을 작성하고 단일관로모형에 의한 열수력동특성계산모형과 결합하여 가압경수로의 3차원로심동특성계산코드를 개발하였다. 가압경수로의 3차원로심과도과정에 대한 수치계산결과는 선행연구결과와 잘 일치하였다.

참 고 문 헌

[1] A. Nahla Abdallah; Annals of Nuclear Energy, 28, 89, 2016.
[2] Yun Cai et al.; Annals of Nuclear Energy, 150, 84, 2016.
[3] P. F. Wang et al.; Annals of Nuclear Energy, 62, 208, 2013.
[4] K. Obaidurrahman et al.; Nuclear Engineering and Technology, 42, 3, 259, 2010.
[5] H. Finnemann; Results of LWR core transient benchmarks, NEA/NSC/DOC(93)25, 3, 1993.

주체108(2019)년 6월 5일 원고접수

The Spatial Kinetics Calculation of PWR Core Based on Nodal Green's Function Method and the Single Channel Model

So Chol, *Jang Yong Won* and *Ho Il Mun*

In this paper, we proposed a numerical method to perform the coupled 3D neutron kinetics/thermal-hydraulics calculations for the PWR core, and verified its accuracy by comparison with results of the benchmark problem.

Key words: NGFM, single channel model

주체108(2019)년 차례묶음

제1호

제3호

Juche 108(2019)－Arrangement Bundle

Number 1

Number 2

Number 3

Number 4

JOURNAL OF
KIM IL SUNG UNIVERSITY
Physics

Vol. 65 No. 4
JUCHE 108(2019)
(SN 577)

CONTENTS

Issued by
PUBLISHING HOUSE OF **KIM IL SUNG** UNIVERSITY

김일성종합대학학보 물리학　　주체108(2019)년 제65권 제4호 (루계 제577호)

편 집 위 원 회

낸 곳 김일성종합대학출판사
인쇄소 김일성종합대학인쇄공장
인쇄 주체108(2019)년 10월 30일 발행 주체108(2019)년 11월 10일

ㄱ－1972310　　값 200원

DPR Korea
Address: Ryongnam-dong, Ryomyong Street,
Taesong District, Pyongyang
E-mail: ryongnamsan@star-co.net.kp
Fax: 0085-02-381-4410, 0085-02-381-4427

정기간행물번호
제19924호